

## 1.7. Функция распределения по энергиям.

### 1.7.1. Идеальный газ.

Учитывая определяющую роль энергии в функции распределения по состояниям, естественно перейти от вероятности попадания молекулы в объем фазового пространства  $d\Gamma = d\Gamma_q d\Gamma_p = d\Gamma_r d\Gamma_p$  (т.е. иметь определенные координаты и импульсы) к вероятности для молекулы иметь энергию  $E$ .

Для идеального газа, не находящегося во внешнем потенциальном поле, нет необходимости рассматривать пространственную часть объема фазового пространства  $d\Gamma_r$ , так как энергия, и соответственно функция распределения, не зависит от координат для невзаимодействующих молекул.

Для идеального газа удобно рассмотреть в качестве подсистемы одну молекулу. Итак, ищем вероятность для молекулы находиться в состоянии с энергией в интервале от  $E$  до  $(E+dE)$ . Энергия молекулы равна

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2},$$

то есть определенная кинетическая энергия соответствует определенному значению скорости или импульса. В пространстве скоростей  $v$ , или импульсов  $p$  (по модулю), область, соответствующая диапазону энергии  $(E \div E + dE)$ , имеет вид тонкого шарового слоя, радиусом  $p = \sqrt{2mE}$  (рис. 7.1)

Вероятность того, что энергия молекулы находится в диапазоне  $(E \div E + dE)$ , равна по теореме о сложении вероятностей интегралу (сумме вероятностей):

$$dP(E) = \int_{p \div p+dp} \rho(E(p_x, p_y, p_z)) dp_x dp_y dp_z, \quad (1.7.1)$$

где интегрирование ведется по всем проекциям шаровому слою от  $p$  до  $p + dp$ . Так как шаровой слой очень тонкий по энергии (или по модулю импульса), то функцию  $\rho(E)$  внутри области интегрирования можно считать постоянной, так как  $E$  практически не меняется. Вынесем плотность вероятности  $\rho(E)$  за знак интеграла:

$$dP(E) = \rho(E) \cdot \int_{p \div p+dp} d\Gamma_p = \rho(E) \cdot d\Gamma_E \quad (1.7.2)$$

Здесь ввели обозначение:

$$d\Gamma_E = \int_{p \div p+dp} d\Gamma_p \quad (1.7.3)$$

Здесь  $d\Gamma_E$  – объем шарового слоя радиуса  $p$ . Сосчитаем его. Объем шара радиуса  $p$  в импульсном пространстве равен:

$$\Gamma_{\text{шар}} = \frac{4}{3} \pi p^3 = \frac{4}{3} \pi (2mE)^{3/2} \quad (1.7.4)$$

Объем шарового слоя равен (рис. 7.1):

$$d\Gamma_E = d\Gamma_{\text{шар}} = 4\pi p^2 dp. \quad (1.7.5)$$

Учитывая, что для идеального газа  $p = \sqrt{2mE}$ , запишем этот объем шарового слоя (1.7.5) через энергию:

$$d\Gamma_E = \frac{d\Gamma_{\text{шар}}}{dE} dE = 4\pi p^2 \frac{dp}{dE} dE \quad (1.7.6)$$

Вычисляя производную  $dp/dE$ , получаем

$$p^2 \frac{dp}{dE} = m\sqrt{2mE}.$$

Итак, вероятность того, что молекулы идеального газа имеют энергию в интервале от  $E$  до  $E + dE$ , равна:

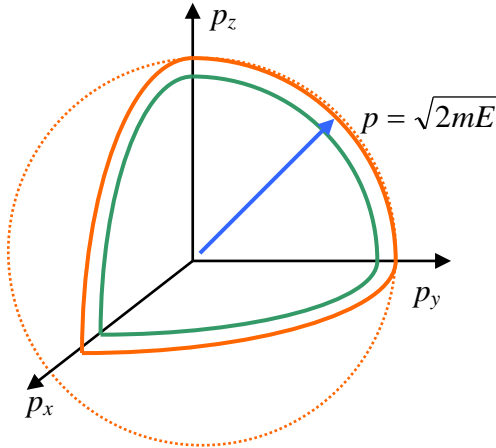


Рис. 7.1.

$$dP(E) = 4\pi m^{3/2} \sqrt{2E} \rho(E) \cdot dE = \rho_E(E) dE \quad (1.7.7)$$

Функция распределения молекул по их энергиям, следовательно, определяется соотношением:

$$\rho_E(E) = 4\pi m^{3/2} \rho(E) \sqrt{2E} \quad (1.7.8)$$

Важно отличать друг от друга две функции распределения  $\rho(E)$  и  $\rho_E(E)$ :

- 1) Функция распределения  $\rho(E) = \rho(E(p_x, p_y, p_z)) = \rho(E(p))$  для идеального газа есть плотность вероятности обнаружить частицу с определенным импульсом  $p$ , лежащим в единице «объема пространства импульсов» (см «элементарный кубик импульсов» на рис. 6.2). В общем случае системы с большим числом степеней свободы функция распределения  $\rho(E) = \rho(E(q, p))$  представляет собой плотность вероятности обнаружить систему в единице фазового объема с определенными координатами  $q$  и  $p$ . Это есть *микрораспределение* –  $\rho(E) = \rho(E(q, p))$ .
- 2) Функция распределения  $\rho_E(E)$  для идеального газа представляет собой плотность вероятности обнаружить систему в состоянии с определенной энергией *при всех возможных импульсах*, соответствующих этой энергии, т.е. шаровой слой в пространстве импульсов. В случае системы с большим числом степеней свободы  $\rho_E(E)$  – это плотность вероятности обнаружить систему в состоянии с определенной энергией при всех координатах  $q$  и импульсах  $p$ , соответствующих этой энергии (условный «шаровой слой» в многомерном фазовом пространстве), иначе,  $\rho_E(E)$  есть *макрораспределение*.

Примечание 1. Если функция микрораспределения  $\rho(E) = \rho(E(q, p))$  определена в пространстве скоростей  $\rho(E) = \rho(E(q, v))$  (то есть  $E = mv^2/2$ ), а не импульсов, то вероятность для молекул идеального газа иметь энергию в интервале от  $E$  до  $E + dE$  равна:

$$dP(E) = 4\pi m^{-3/2} \sqrt{2E} \rho(E) \cdot dE = \rho_E(E) dE \quad (1.7.9)$$

### 1.7.2. Зависимость $\rho(E)$ от энергии.

Используя общие вероятностные соображения, можно найти зависимость функции распределения  $\rho(E)$  – т.е. микрораспределения – от энергии. Выделим в газе квазизамкнутую подсистему, состоящую из двух не взаимодействующих молекул. Энергия подсистемы – аддитивная величина:

$$E = E_1 + E_2. \quad (1.7.10)$$

Функция распределения подсистемы по теореме умножения вероятностей для статистически независимых событий равна произведению функций распределения

$$dP = \rho(E) d\Gamma_{p1} d\Gamma_{p2} = \rho(E_1) \rho(E_2) d\Gamma_{p1} d\Gamma_{p2} \\ \rho(E) = \rho(E_1) \cdot \rho(E_2) \quad (1.7.11)$$

Таким образом, функция распределения – *не аддитивная величина*. Однако нам всегда удобнее работать с аддитивными величинами в квазизамкнутой системе. Поэтому удобнее рассматривать логарифм распределения, который есть аддитивная величина от энергии:

$$\ln \rho(E) = \ln \rho(E_1) + \ln \rho(E_2). \quad (1.7.12)$$

При сложении энергий (1.7.10) складываются и логарифмы функций распределения (1.7.12). Однако такое одновременное выполнение соотношений (1.7.10) и (1.7.12) можно совместить только тогда, когда  $\ln \rho(E)$  является линейной функцией энергии  $E$ :

$$\ln \rho(E) = \alpha + \beta E, \quad (1.7.13)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  неизвестные пока постоянные. Итак, общий вид функции распределения можно представить:

$$\rho(E) = \text{const} \cdot e^{\beta E}. \quad (1.7.14)$$

В дальнейшем мы проведем общий вывод функции распределения и получим значение коэффициента  $\beta$ .

### 1.7.3. Произвольная квазизамкнутая подсистема.

До сих пор рассматривали идеальный газ. Однако все эти рассуждения могут быть применены к произвольному макроскопическому телу (неидеальные газы, жидкость, твердое тело). Разбивая систему на квазизамкнутые подсистемы, записываем полную энергию подсистемы как сумму энергий частиц (молекул):

$$E = \sum_i E_i, \quad (1.7.15)$$

где в энергию  $E_i$  входит не только кинетическая, но и потенциальная энергии частиц. При этом энергия подсистемы есть функция координат (в отличие от идеального газа) и импульсов  $E = E(q, p)$ , где  $q$  – совокупность координат:  $q = x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots$ , а  $p$  – совокупность соответствующих импульсов:

$p = p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}, \dots$ . Вероятность подсистемы попасть в элемент объема  $d\Gamma$  многомерного фазового пространства определяется:

$$dP(q, p) = \rho(q, p)d\Gamma \quad (1.7.16)$$

Здесь  $d\Gamma = d\Gamma_q d\Gamma_p = dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 \dots dp_{1x} dp_{1y} dp_{1z} dp_{2x} \dots = d^{2n}\Gamma$  – дифференциал  $2n$  порядка (или  $6N$ ), где  $n$  число степеней свободы ( $N$  число одноатомных молекул в квазизамкнутой системе). Из стационарности функции распределения  $\rho(q, p)$  следует, что она зависит лишь от интегралов движения, а именно энергии:

$$\rho(E(q, p)) = \rho(E(x_1, y_1, z_1, \dots, p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, \dots)) \quad (1.7.17)$$

Перейдем от *микрораспределения*  $\rho(q, p)$  к *макрораспределению*  $\rho_E(E)$ . Для этого, как и ранее для одной молекулы идеального газа, найдем вероятность состояния системы с энергией от  $E$  до  $E + dE$ . Приравняв энергию постоянной величине  $E = E(q, p) = const$ , мы определяем поверхность в многомерном фазовом пространстве. Тогда значениям энергии от  $E$  до  $E + dE$  отвечает условный “шаровой” слой в многомерном фазовом пространстве  $p$  и  $q$ , которому соответствует многочисленное множество значений  $q$  и  $p$ :

$$dP(E) = \int_{E \div E+dE} \rho(E(x_1, y_1, z_1, \dots, p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, \dots)) d^{2n}\Gamma = \rho(E) \cdot \int_{E \div E+dE} d^{2n}\Gamma = \rho(E)d\Gamma_E \quad (1.7.18)$$

Здесь введен объем многомерного “шарового” слоя

$$d\Gamma_E = \int_{E \div E+dE} d^{2n}\Gamma,$$

в котором интеграл берется по  $(2n-1)$  переменной (или по  $6N-1$  переменным одноатомного газа), поэтому  $d\Gamma_E$  – дифференциал первого порядка. Поскольку рассматривается тонкий “шаровой” слой, то можно считать  $\rho(E(q, p))$  постоянной внутри этого слоя и вынести за знак интеграла.

Как и ранее для идеального газа запишем дифференциал  $d\Gamma_E$  через энергию  $dE$  и вводим функцию макрораспределения подсистемы по энергиям:

$$d\Gamma_E = \frac{\partial \Gamma_E}{\partial E} dE \quad (1.7.19)$$

$$dP(E) = \rho(E) \frac{\partial \Gamma_E}{\partial E} dE = \rho_E(E) dE \quad (1.7.20)$$

Итак, *функция распределения подсистемы по энергиям*:

$$\rho_E(E) = \rho(E) \frac{\partial \Gamma_E}{\partial E}. \quad (1.7.21)$$

При этом выполняется следующее условие нормировки:

$$\int_{\text{все } E} dP(E) = \int_{\text{все } E} \rho_E(E) dE = \int_{\text{все } E} \rho(E) \frac{\partial \Gamma_E}{\partial E} dE = 1. \quad (1.7.22)$$

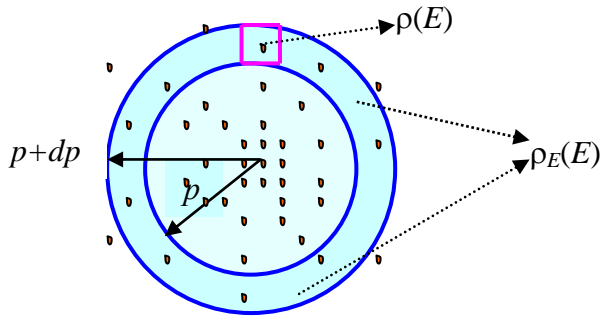


Рис. 7.2.

Еще раз следует напомнить, что  $\rho(E) = \rho(E(q, p))$  – это плотность вероятности иметь энергию от  $E$  до  $E + dE$ , но только в единице фазового объема  $d\mathbf{P}/d^{2n}\Gamma$ , а  $\rho_E(E)$  – плотность вероятности иметь энергию от  $E$  до  $E + dE$  во всем фазовом пространстве  $d\mathbf{P}/dE$ .

Поясним их различие на примере со стрельбой по мишени (см рис. 7.2). Например, определяем вероятность попадания в “восьмерку” при стрельбе по мишени. При этом обычно каждый выстрел и попадание в мишень определяют “часам циферблата”.

Так квадратик на рис. 7.2 определяет попадание в “восьмерку на 12 часов”. Итак, функция  $\rho(E) = \rho(E(q, p))$  дает вероятность попасть, например, в “восьмерку” в определенном направлении (и в единицу площадки около восьмерки – квадратик на рис. 7.2). Такая же вероятность была бы для попадания в “восьмерку на 3 часа”, на 5 часов и т.д. В то же время функция  $\rho_E(E)$  – макрораспределение – это вероятность вообще попасть в восьмерку при любых “часах”, то есть в любое место внутри кольца. Для ее получения мы должны просуммировать все вероятности попадания на все возможные “часы”.