

П.А. Беспалов
О.Н. Савина

**ЛЕКЦИИ
ПО
СТАТИСТИЧЕСКОЙ
МЕХАНИКЕ**



Нижний Новгород 2013

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Р.Е. АЛЕКСЕЕВА»

П.А. БЕСПАЛОВ О.Н. САВИНА

ЛЕКЦИИ ПО СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

*Рекомендовано Ученым советом Нижегородского государственного
технического университета им. Р.Е. Алексеева
в качестве учебного пособия для студентов дневной формы обучения,
обучающихся по направлениям подготовки бакалавриата 140100, а также
специальности 141401*

Нижний Новгород 2013

УДК 536.7+531.19

ББК 22.317

Б 534

Рецензент

Главный научный сотрудник ИПФ РАН,
доктор физико-математических наук, профессор Ю.В. Чугунов

Беспалов П.А., Савина О.Н.

Б 534 Лекции по статистической механике: учеб. пособие /

П.А.Беспалов, О.Н. Савина; Нижегород. гос. техн. ун-т. им. Р.Е. Алексеева.
- Н. Новгород, 2013. - 88 с.

ISBN 978-5-502-00177-9

Учебное пособие содержит краткое изложение основных положений классической статистической механики. Вводятся понятия фазового пространства и фазового ансамбля, статистического распределения, функции распределения и относительной величины разброса. Отмечается важная роль теоремы Лиувилля в статистике. Обсуждаются распределения Гиббса, статистический интеграл, а так же вывод термодинамических соотношений из классической статистики. Излагается возможность применения теории к идеальному одноатомному газу. Доказывается теорема о равнораспределении кинетической энергии по степеням свободы. Рассматривается теплоемкость газов и теплоемкость твердых тел. Обсуждается применение классической статистики к излучению. Проводится статистический вывод принципа возрастания энтропии.

Особое место уделяется вопросам квантовой статистики. Излагается теория теплоемкости твердых тел по Эйнштейну и Дебаю. Выводится формула Планка. Обсуждаются системы тождественных частиц. Подробно изучаются статистика Бозе и статистика Ферми-Дирака. Вводится понятие о сверхтекучести и сверхпроводимости. Проводится статистический вывод принципа возрастания энтропии.

Для студентов физических и инженерно-физических специальностей.

Рис. 25. Табл. Библиограф.: 7 назв.

УДК 536.7+531.19

ББК 22.317

ISBN 978-5-502-00177-9

© Нижегородский государственный
технический университет
им. Р.Е.Алексеева, 2013

© Беспалов П.А., Савина О.Н., 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	5
ЧАСТЬ I. ВВЕДЕНИЕ В КЛАССИЧЕСКУЮ СТАТИСТИЧЕСКУЮ МЕХАНИКУ	
1. Некоторые теоремы механики.....	6
1.1 Уравнения Гамильтона.....	6
1.2 Фазовое пространство и фазовый ансамбль.....	6
1.3. Теорема Лиувилля в механике.....	19
1.4. Возвратная теорема Пуанкаре и Цермело.....	10
2. Статистическое распределение.....	12
2.1. Функция распределения, средние физических величин и эргодичность.....	12
2.2. Относительная величина разброса.....	13
2.3. Функция распределения невзаимодействующих подсистем.....	14
2.4. Теорема Лиувилля в статистике.....	16
3. Большое каноническое распределение Гиббса.....	17
3.1. Большой канонический ансамбль.....	17
3.2. Большое каноническое распределение Гиббса.....	18
3.3. Условие нормировки.....	19
4. Распределение Гиббса и термодинамические функции.....	21
4.1. Термодинамические функции.....	21
4.2. Вывод термодинамических соотношений.....	23
4.3. Энтропия.....	25
5. Каноническое распределение Гиббса.....	27
5.1. Канонический ансамбль.....	27
5.2. Каноническое распределение Гиббса.....	27
5.3. Термодинамические соотношения.....	27
5.4. Статистический интеграл.....	28
5.5. Вывод термодинамических соотношений для идеального одноатомного газа.....	29
5.6. Распределение Максвелла-Больцмана как пример канонического распределения Гиббса.....	32
6. Микроканоническое распределение.....	37
6.1. Постулат равновероятности.....	37
6.2. δ -функция Дирака.....	38
6.3. Функция распределения для микроканонического ансамбля.....	39
6.4. Физический смысл нормировочной константы.....	40
7. Применение теории к классическим системам.....	41
7.1. Теорема о равномерном распределении кинетической энергии по степеням свободы.....	41
7.2. Вириальная теорема.....	43
7.3. Некоторые примеры применения теоремы о равномерном распределе-	

нии кинетической энергии по степеням свободы и теоремы о вириале	44
7.4. Закон Дюлонга и Пти.....	47
7.5. Связанные колебания. Нормальные координаты.....	47
7.6. Волны в распределенной системе.....	49
7.7. Формула Рэлея Джинса.....	54
8. Энтропия.....	56
8.1. Энтропия в классической термодинамике. Второе начало термодинамики.....	56
8.2. Энтропия в статистической механике.....	58
8.3. Статистический вывод принципа возрастания энтропии.....	58
8.4. Энтропия и информация.....	61
8.5. Теорема Нернста.....	62
ЧАСТЬ II. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ	
9. Элементы квантовой статистики.....	59
9.1. Некоторые положения квантовой механики.....	59
9.2. Матрица плотности.....	60
9.3. Теорема Лиувилля в квантовой статистике.....	62
9.4. Большое каноническое и каноническое распределение Гиббса...	62
9.5. Третье начало термодинамики.....	63
10. Применение квантовой статистики.....	64
10.1. Теплоемкость твердых тел.....	63
10.2. Теплоемкость двухатомного идеального газа.....	68
10.3. Формула Планка.....	69
11. Распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.....	70
11.1. Симметричные и антисимметричные волновые функции.....	70
11.2. Распределение Бозе-Эйнштейна.....	71
11.3. Распределение Ферми-Дирака.....	72
11.4. Статистика Бозе и Ферми частиц в непрерывном спектре энергий.....	73
11.5. Энергия Ферми.....	75
11.6. Теплоемкость свободного электронного газа при низких температурах.....	76
11.7. Конденсация идеального газа Бозе-Эйнштейна.....	77
11.8. Переход от квантовой статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми- Дирака к классической.....	80
Список рекомендуемой литературы.....	82

ПРЕДИСЛОВИЕ

Статистическая механика — это раздел теоретической физики, посвященный изучению как классических, так и квантовых систем с большим числом степеней свободы. Центральные для статистической механики представления об атомизме строения материи обсуждались с античных времен. С шестнадцатого века до второй половины девятнадцатого века усилиями многих исследователей развивалась термодинамика — учение о медленных (равновесных) тепловых процессах. Статистическая механика возникла в процессе исследований по дедуктивному описанию тепловых процессов на основе представлений о молекулярном и атомном строении вещества.

В рамках статистической механики удается вывести термодинамические свойства многих реальных систем: идеальных газов, реальных газов, квантовых газов и некоторых простых конденсированных сред. Определяются явные выражения для используемой в термодинамике энтропии и внутренней энергии, выясняется смысл закона неубывания энтропии. Соответствующие теоретические результаты тесно связаны со многими фундаментальными и практическими задачами, например, с технологией производства наноматериалов.

Математические методы, применяемые в статистической физике, очень разнообразны. Это методы классической и квантовой механики, квантовой теории поля, теория нелинейных уравнений, теория стохастических дифференциальных уравнений, а также различные методы математической физики. Все более важную роль в современной статистической физике играют численные методы, моделирующие реальные процессы.

Напряженные исследования дали возможность получить фундаментальные результаты. Статистическая физика позволила объяснить и количественно описать сверхпроводимость, сверхтекучесть, турбулентность, коллективные явления в твердых телах и плазме, структурные особенности жидкостей. Она лежит в основе современной астрофизики. В настоящее время методы статистической физики применяются не только к атомам и молекулам, но и в более общем формате физики систем со сложной динамикой. Многие современные экспериментальные методы исследования вещества целиком базируются на статистическом описании системы. Основам статистической физики посвящено много книг, отличающихся объемом материала и методикой его представления, но пока не сложилось канонического стиля изложения материала.

Данная книга написана на основе многолетнего опыта преподавания статистической механики на физико-техническом факультете Нижегородского государственного технического университета. В итоге работы у пытливого студента есть возможность научиться методам статистической механики, позволяющим из движений отдельных частиц определить усредненные свойства макроскопической системы в целом.

ЧАСТЬ I. ВВЕДЕНИЕ В КЛАССИЧЕСКУЮ СТАТИСТИЧЕСКУЮ МЕХАНИКУ

1. НЕКОТОРЫЕ ТЕОРЕМЫ МЕХАНИКИ

1.1. Уравнения Гамильтона

Последовательное рассмотрение вопросов статистической механики мы начнем с повторения важных основ классической механики.

Положение материальной точки в пространстве определяется радиус-вектором $\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z$, где x , y , z - декартовы координаты. Если материальная точка движется в выбранной системе отсчета, то радиус-вектор – функция времени t : $\vec{r}(t) = \{x(t), y(t), z(t)\}$. Зная радиус-вектор, можно определить зависимость скорости \vec{v} и ускорения \vec{a} материальной точки от времени:

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}, \quad \vec{a} = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}. \quad (1.1)$$

Изменение положения материальной точки массой m во времени задается силой \vec{F} , действующей на точку, и определяется путем решения уравнения движения, которое представляет собой второй закон Ньютона, записанный в дифференциальной форме:

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{\vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)}{m}. \quad (1.2)$$

Решение этого уравнения будет единственно, если известны начальное положение материальной точки, определяемое радиус-вектором \vec{r}_0 , и ее начальная скорость \vec{v}_0 . При движении частицы в потенциальном поле сила связана с потенциальной энергией известным соотношением $\vec{F} = -\nabla U$, где $U(\vec{r})$ - потенциальная энергия, $\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$.

Таким образом, для однозначного определения положения материальной точки в пространстве в данный момент времени требуется три числа – три независимые координаты (x, y, z) . Для однозначного определения ее положения в любой момент времени требуется не более шести чисел: проекции \vec{r}_0 и \vec{v}_0 на оси декартовой системы координат.

Число независимых величин, задание которых необходимо для однозначного положения системы, называется числом степеней свободы. Если система имеет n степеней свободы, тогда любые n величин q_1, q_2, \dots, q_n , характеризующие положение системы, называются обобщенными координатами, а производные по времени от этих величин называются обобщенными скоростями.

Таким образом, для того, чтобы задать положение системы в данный момент времени, нужно знать n обобщенных координат $(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_n)$. Чтобы знать дальнейшее поведение системы нужно знать еще n обобщенных скоростей $(\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_k, \dots, \dot{q}_n)$ (или импульсов $(p_1, p_2, \dots, p_k, \dots, p_n)$) в тот же момент времени.

Энергия $H(\vec{q}, \vec{p})$ системы - функция обобщенных координат и импульсов. Как известно, дифференциальные уравнения движения любой консервативной механической системы, имеющей интеграл энергии, могут быть записаны в форме уравнений Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \\ \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (1.3)$$

Для однозначного решения системы (1.3) необходимо задать n начальных координат q_{0k} и n начальных импульсов p_{0k} . Функцию $H(\vec{q}, \vec{p})$ называют функцией Гамильтона (гамильтонианом), и в простейших случаях она может быть представлена как сумма кинетической K и потенциальной U энергий:

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = K(\vec{p}) + U(\vec{q}). \quad (1.4)$$

В частном случае одномерного движения материальной точки (движение описывается одной координатой x – одна степень свободы) функция Гамильтона имеет вид:

$$H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + U(x). \quad (1.5)$$

1.2. Фазовое пространство и фазовый ансамбль

Рассмотрим сначала случай одномерного движения материальной точки под действием только консервативных сил. Тогда функция Гамильтона будет постоянной за все время движения материальной точки

$$H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) = E = \text{const.} \quad (1.6)$$

Для гармонического осциллятора $U(x) = \kappa x^2 / 2$ и уравнение (1.6) описывает на координатной плоскости (p_x, x) семейство эллипсов (рис.1). Положение

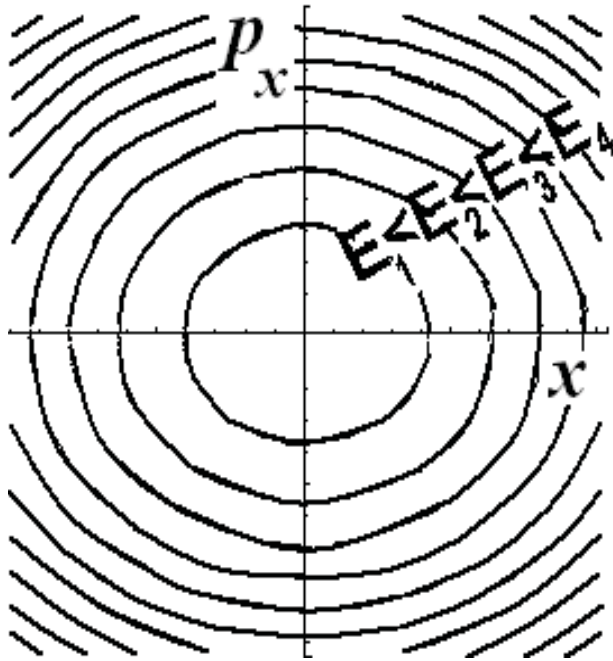


Рис.1

изображающей точки определяет значение координаты и импульса материальной точки в данный момент времени. С течением времени координата и импульс материальной точки меняются, и изображающая точка перемещается по фазовой плоскости вдоль траектории, называемой фазовой траекторией. Вид фазовой траектории определяется значением полной энергии гармонического осциллятора и параметрами, определяющими его собственную частоту колебаний (в нашей задаче эти параметры масса m и жесткость пружины k). Очевидно, что область

допустимых значений энергии определяет геометрическое место точек на фазовой плоскости, определяющих допустимое положение изображающих точек. Для гармонического осциллятора – это область, ограниченная предельным эллипсом, соответствующим максимальному значению энергии E . Таким образом, изображающие точки, соответствующие всем возможным состояниям материальной точки, движущейся вдоль прямой, непрерывно заполняют некоторую область на фазовой плоскости.

Для описания состояния материальной точки с тремя степенями свободы потребуется шестимерное фазовое пространство с координатными осями (x, y, z, p_x, p_y, p_z) , а изображающие точки, соответствующие всем возможным состояниям материальной точки, будут занимать некоторый шестимерный объем в шестимерном фазовом пространстве.

Рассмотрим систему, состоящую из N материальных точек. Для описания ее состояния одной изображающей точкой потребуется $6N$ обобщенных координат и импульсов или $6N$ -мерное фазовое пространство. Другими словами, если величины \vec{q} и \vec{p} рассматривать как прямоугольные координаты, то в фазовом пространстве $2n$ измерений, где n - число степеней свободы, состояние системы характеризуется одной изображающей точкой. С течением времени изображающая точка перемещается по фазовой траектории.

Точное решение задачи о положении изображающей точки для системы материальных точек возможно только путем решения уравнений движения всех атомов и молекул. Для N материальных точек это $6N$ скалярных