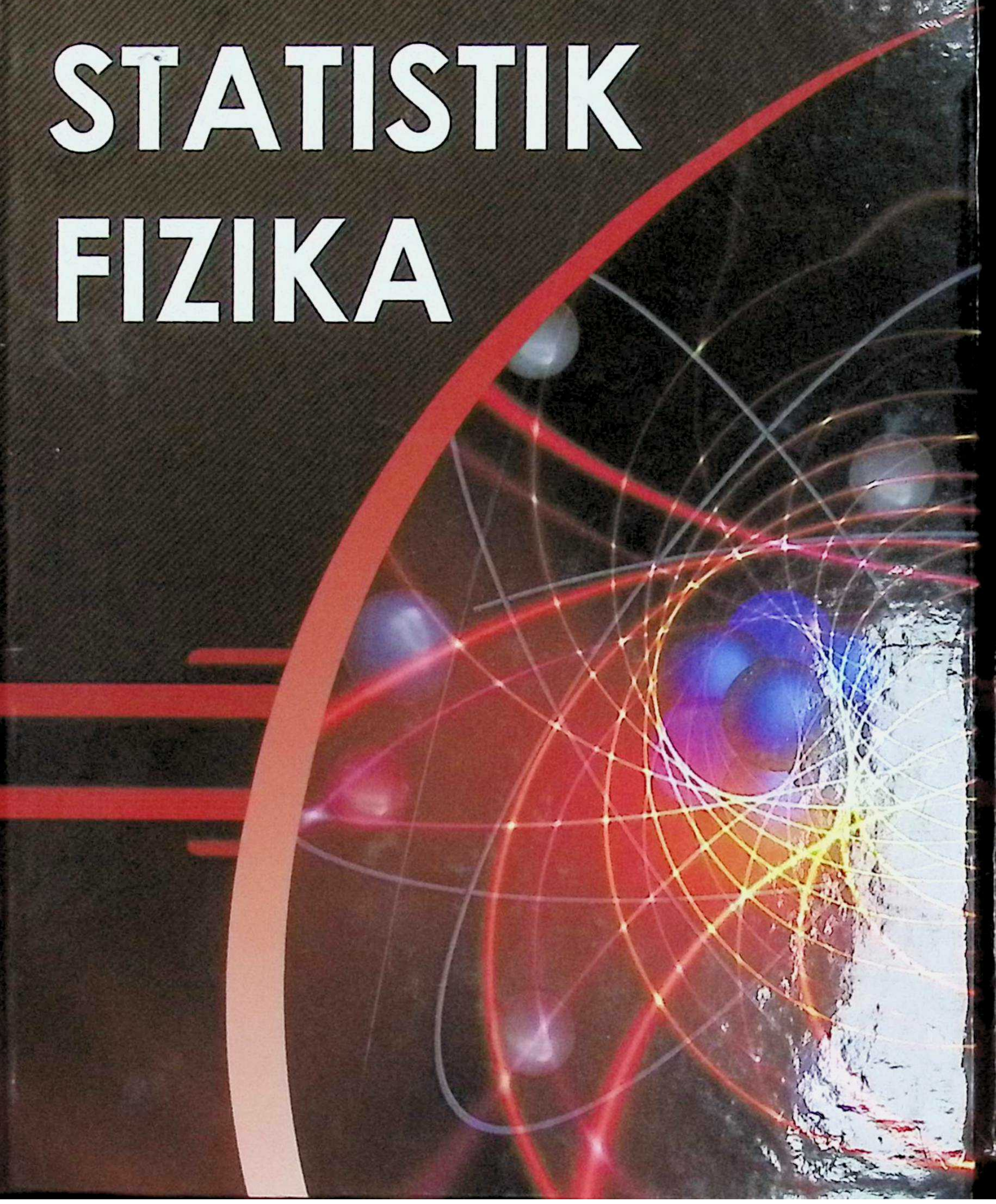
Fayzullayev Biruniy Amanullaevich

STATISTIK FIZIKA



NAZARIY FIZIKA KURSI

4 - JILD

Prof. A. A. Abdumalikov umumiy tahriri ostida

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY TA'LIM,
FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI
MIRZO ULUG'BEK NOMIDAGI
O'ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI

Fayzullayev Biruniy Amanullaevich

STATISTIK FIZIKA

5140200-Fizika

Buxoro-2024
«DURDONA» nashriyoti

KBK 22.317ya7
UO'K 536.9(075)
F 20

Statistik fizika [Matn] : darslik / Fayzullayev Biruniy Amanullaevich – Buxoro: «Sadriddin Salim Buxoriy» Durdona nashriyoti, - 2024. – 308 b.

Taqrizchilar:

B.F.Irgaziyev – fizika - matematika fanlari doktori, professor,
E.Z.Imamov – fizika - matematika fanlari doktori, professor.

Mazkur darslik universitetlarning fizika fakultetlarida o‘tiladigan nazariy fizika kursining ohirgi qismi bo‘lgan Statistik fizika faniga bag‘ishlangan bo‘lib, unda Liouville teoremasi, entropiya, mikrokanonik, kanonik va makrokanonik taqsimotlar, termodinamika, temperatura, ideal gaz, issiqlik sig‘imining ilgarilanma, aylanma va tebranma qismlari, Fermi va Bose taqsimotlari, qattiq jism termodinamikasi, Van der Waals gazi, faza o‘tishlari va kinetik tenglama mavzulari ko‘rib chiqilgan. Ushbu darslik oliy ta’lim muassasalari fizika, astronomiya va texnika yo‘nalishida ta’lim olayotgan talabalarga mo‘ljallangan.

В этом учебнике, посвященном статистической физике, являющейся последней частью Курса теоретической физики, рассмотрены теорема Лиувилля, энтропия, микроканоническое, каноническое и макроканоническое распределения, термодинамика, температура, идеальный газ, поступательное, вращательное и колебательное части теплоемкости, распределения Ферми и Бозе, термодинамика твердого тела, газ Ван дер Ваальса, фазовые переходы и кинетическое уравнение. Учебник предназначен для студентов высших учебных заведений, обучающихся по физике, астрономии и технике.

In this book, devoted to statistical physics, which is the last part of the Course of Theoretical physics, are considered such topics as the Liouville theorem, the entropie, mikro-, makro- and canonical distributions, thermodynamics, temperature, the ideal gaz, rotational and vibrational parts of specific heat, Fermi and Bose distributions, solid state thermodynamics, gas of Van der Waals, phase transitions and kinetic equations, The textbook is intended for students learning physics, astronomy and technics.

ISBN 978-9910-04-689-6

So‘z boshi

Statistik fizika nazariy fizika kurslari ichida alohida bir o‘rin tutadi. Fizika fani tajribaviy fan deb o‘rganganmiz, statistik fizika va undan ajratib bo‘lmaydigan termodinamika bu tasdiqqa yorqin misoldir. Termodinamika fani issiqlik mashinalarining ishini o‘rganish, ularning effektivligini tushuntirib berish davomida XVIII-asrning ikkinchi yarmida rivojlana boshlagan. Bu rivojlanish tajriba bilan bevosita va kuchli bog‘langan holda ro‘y bergan. XIX - asrning 40-yillariga kelib termodinamikaning birinchi qonuni deyiladigan tasdiq aniqlangan, yana bir necha o‘n yillik o‘tgandan keyin termodinamikaning ikkinchi qonuni – entropiyaning o‘sishi qonuni – o‘rnatilgan. James Clerk Maxwell tomonidan 1860 yil topilgan ideal gazning tezliklar bo‘yicha taqsimot funksiyasi statistik fizikaning birinchi buyuk yutug‘i bo‘ldi. Ludwig Boltzmann tomonidan 1972 yilda kinetik tenglamaning yaratilishi fizik kinetika fanining rivojlanishiga asos soldi. 1902 yilda Josiah Willard Gibbs tomonidan chiqarilgan asarda mikrokanonik, kanonik va makrokanonik taqsimotlar kiritilishi klassik statistik fizika fanining asoslanishiga olib keldi. 1912 yilda Walter Nernst termodinamikaning uchinchi qonunini o‘rnatadi, shu bilan, termodinamika fanini statistik fizikaga bog‘lamasdan ham rivojlantirish yo‘li to‘liq o‘rnatiladi. Fizika qonunlarining hammasi kvant tabiatga ega, shu jumladan, statistik fizika ham. 1924 yilda Satyendra Nath Bose va 1926 yilda Enrico Fermi tomonidan kvant statistikaning bozonlar va fermionlarga mos keluvchi formalari o‘rnatiladi, shu bilan, kvant statistk fizikasiga asos solingan bo‘lib chiqadi. Termodinamika va statistik fizikaga katta hissa qo‘shgan olimlarning ro‘yhati uzundir, qo‘lingizdagi kitobda ularning hissalari mos kelgan joylarda aytib ketilgan.

Qo‘lingizdagi kitob O‘zbekiston Milliy Universiteti fizika fakultetida ko‘p yillar davomida o‘tib kelingan "Statistik fizika" kursi asosida yozilgan. Statistik fizika nazariy fizika kursining ohirgi, to‘rtinchi qismi bo‘lib, u to‘rtinchi kurs talabalariga bir yil davomida o‘tiladi. Bu kursdan maqsad, makroskopik sistemalarning ilmiy tavsifini talabalarga yetkazishdir.

Bu kursni yaratish davomida muallif adabiyotlar ro'yxatida ko'tsatilgan kitobardan unumli foydalandi. Ayniqsa, Landau-Lifshitzning "Статистическая физика" kitobi va R.Kuboning adabiyotlar ro'yxatida keltirilgan kitoblarining muallifga ta'sirini sezish mumkin. Kitobning ichida misol va mashqlar juda ko'p – ularning soni 200 ga yaqin. Bu misol va mashqlar fanning muhim qismi sifatida qaralishi kerak, ularni yechib tahrir qilishsiz kitobdagi materialni o'zlashtirib bo'lmaydi. Ammo o'quvchi masalalarni yechganda darrov javoblardan foydalanishga shoshilmasligi kerak, faqatgina masalani yechish katta qiyinchiliklarga olib kelganidagina kitobning ohiridagi yechimdan foydalanish mumkin.

Qo'lingizdagi kitob O'zMU fizika fakulteti "Nazariy fizika" kafedrasi professor-o'qituvchilari tomonidan yaratilgan "Nazariy fizika kursi" ning to'rtinchi jildidur. "Nazariy fizika kursi" ning birinchi nashrida to'rtinchi jild sifatida kafedramiz o'qituvchilari A.A.Abdumalikov va R.Mamatqulovlarning 2006 yil chiqqan "Termodinamika va statistik fizika" kitobi taklif qilingan edi. Ammo bu kitob mualliflari olamdan o'tganliklari va uni yangi nashrga tayyorlashning ilojisi bo'lmaganligi sababli kafedraning qarori bilan yangi kitob yozildi. Umidvormizki, birinchi nashrga tegishli kitob va qo'lingizdagi kitob bir-birini to'ldirib turadi va yoshlarimizga yana ko'p yil xizmat qiladi.

1-BOB.

Statistik fizikaning asosiy tushunchalari

1.1 Statistik metod

Termodinamika va statistik fizika fanida ko'riladigan sistemalar soni juda katta bo'lgan atomlar, molekulalar, ionlar va elementar zarrachalardan iborat. Masalan, bir kub santimetr havoning ichida normal sharoitda $\sim 10^{19}$ ta molekula mavjud bo'ladi, qattiq jismning ichida esa $\sim 10^{22}$ ta. Bunday sistemaga kirgan molekulalarning harakatini mexanik metod bilan o'rganish uchun o'sha sondagi (klassikada Newton, kvantmexanikasida Schrodinger) tenglamalarni yozish va yechib chiqish (hamma boshlang'ich shartlarni hisobga olib) kerak bo'lar edi. Buning esa hech qanday ilojisi yo'q, chunki zarrachalarning soni aql bovar qilmaydigan darajada ko'pdir. Masalan, havoning 1 sm^3 hajmi ichida normal sharoitda $\sim 2,5 \cdot 10^{19}$ ta molekula bo'ladi, qattiq jismning ichida 1 sm^3 hajm ichida $\sim 10^{22}$ ta atomlar bordir. Birinchi qarashda bunday vaziyat makroskopik sistemalarning hossalarini o'rganishga imkoniyati yo'q ekan deyishga olib kelishi kerak edi.

Ammo tajriba va fanning rivojlanishi shuni ko'rsatadiki, makroskopik sistemalar uchun maxsus makroskopik o'rtacha kattaliklar kiritish mumkin ekan, bu kattaliklar orasida statistik deyiladigan munosabatlar o'rnatib makrosistemalar bo'ysunadigan asosiy qonuniyatlarni keltirib chiqarish mumkin ekan.

Bu yo'lda qismsistema tushunchasi muhim rol o'ynaydi. Qismsistema deganda makroskopik sistemaning bir tomondan kichik, ikkinchi tomondan shunga qaramasdan o'z ichiga juda ko'p zarrachalarni olgan bir qismi ko'zda tutiladi. Masalan, havoning normal sharoitda xattoki 1mm^3 bo'lgan hajmi ichida $\sim 2,5 \cdot 10^{16}$ ta molekula bo'ladi, o'zining kichikligiga qaramasdan bu ham makroskopik sistemadir. Agar sistema berk deb qaralsa, uning qismsistemalari sistemaning boshqa qismlari tomonidan murakkab bo'lgan ta'sir ostida bo'ladi. Zarrachalar sonining juda kattaligi bilan bog'liq bo'lgan mana shu murakkab va o'ta chalkash o'zaro ta'sirning mavjudligi o'ziga hos qonuniyatlarga olib kelar ekan. Shu qonuniyatlarni o'rganish statistik fizikaning asosiy vazifasidir.

Biz ko'radigan sistemalar muvozanat holida turgan sistemalardir, nomuvozanat statistikasi juda murakkab bo'lib biz uni ko'rmaymiz.

1.2 Fazaviy fazo va taqsimot funksiyasi

Makroskopik sistemalarning asosiy hossalarini fazaviy fazo tilida ifodalash qulaydir. Fazaviy fazo matematik fazo bo'lib, uning koordinatlari umumlashgan impulslar va umumlashgan koordinatalardan iboratdir.

Makroskopik sistemaning bir qismsistemasini olib qaraylik. Uning har bir molekulasiga fazaviy fazoda bir vaqt momenti t da bir nuqta - $p_i, q_i; i = \overline{1, 3N}$ - mos keladi. Uning hamma molekulalariga mos keluvchi nuqtalar to'plami shu fazaviy fazoning ma'lum bir hajmini egallaydi. $t+\delta t$ vaqtda bu to'plamdagi har bir nuqta $p_i + \delta p_i, q_i + \delta q_i$ pozitsiyaga siljiydi. Agar tanlangan qismsistemaga mos keluvchi to'plamni qandaydir chekli vaqt ichida kuzatsak bu qismsistemaga fazaviy fazoda mos keluvchi to'plam (soha) uzliksiz ravishda fazaviy fazoning bir qismidan ikkinchisiga o'tadi. Bunda har bir molekulaga mos keluvchi nuqta fazaviy fazoda bir chiziq chizib chiqadi. Shu chiziqlarning to'plami bizga bir oqimni beradi, bu oqimning har bir vaqtga mos keluvchi kesimi qismsistemaning o'sha vaqtdagi holatini beradi.

Mana shu nuqtalarning to'plami ***fazaviy ansambl*** deyiladi.

N ta zarrachadan iborat sistemaning $3N$ ta umumlashgan koordinatlari $\mathbf{r}_i$, $i = \overline{1, ..., N}$ va $3N$ ta umumlashgan impulslari $\mathbf{p}_i$, $i = \overline{1, ..., N}$ ma'lum bo'lsa ***sistemaning mikroskopik holati*** ma'lum deyiladi. Kvant holiga o'tsak sistemaning mikroskopik holatini (uni n harfi bilan belgilaylik) shu sistemaning to'lqin funksiyasi $\psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t)$ aniqlab beradi, uning yordamida ixtiyoriy fizik kattalik F ning mana shu n-mikroskopik holatdagi o'rtacha qiymati unga mos keluvchi operator $\widehat{F}$ ning o'rtacha qiymati sifatida topiladi:

$$\langle F \rangle_n = \int \psi_n^* \widehat{F} \psi_n d^3 r_1 \cdots d^3 r_N. \tag{1.1}$$

Makroskopik tajriba davomida bor-yo'g'i bir necha ***makroskopik kattaliklar***gina aniqlanishi mumkin bo'lgani uchun uning davomida sistemaning mikroskopik holatini aniqlab bo'lmaydi. Natijada, klassik fizikada, har bir mikroskopik holatga shu holatning bo'lish extimolligi $w(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N; t)$

mos qo'yiladi va ixtiyoriy fizik kattalik $F(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N;\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N;t)$ ning bitta makroskopik holatga mos keluvchi statistik o'rtachasi uning hamma mumkin bo'lgan mikroskopik holatlar bo'yicha o'rtachasi sifatida aniqlanadi:

$$\langle F\rangle = \int F(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N;\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N;t)\, w(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N;\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N;t)\, d^3\mathbf{q}_1\cdots d^3\mathbf{p}_N. \tag{1.2}$$

Ya'na bir ta'kidlab ketaylik, bitta makroskopik holatga bir necha mikroskopik holatlar mos kelishi mumkin, ularga misollar "Entropiya" va "Magnetlar sistemasi" paragraflarida keltirilgan. Integral mana shu mumkin bo'lgan mikroskopik holatlar bo'yicha olinadi.

Statistik fizikaning asosiy g'oyasi shundan iboratki, makroskopik kattalikning yuqoridagi o'rtachasi zarrachalarning soni N juda katta bo'lganda tajribada olinadigan kattalikdan deyarli farq qilmaydi, $N \to \infty$ da esa ularning farqi nolga intilib ketadi.

Kvant mexanikasiga kelsak unda kvantmexanik o'rtacha (1.1) bitta mikroskopik holatga mos keluvchi o'rtachani beradi - chunki kvant mexanikasining o'zi extimoliy xarakterga ega bo'lgan fandir. Makroskopik kvant sistemaga mos keluvchi statistik o'rtacha haqida gapirmoqchi bo'lsak n-mikroskopik holatning berilgan makriskopik holatga kirish extimolligini w_n ni kiritishimiz kerak. Bu holda statistik o'rtacha mos keluvchi o'rtacha (1.1) lardan quyidagicha tuziladi:

$$\langle F\rangle = \sum_n w_n \langle F\rangle_n. \tag{1.3}$$

Bu kiritilgan postulatlar statistik fizika va termodinamikaning asosiy tushunchalarini tashkil qiladi va fanning bir necha yuz yillik tajribasi bilan tasdiqlanadi.

Sistemaning erkinlik darajasi s bo'lsa (N ta zarracha uchun $s = 3N$) koordinatlar sifatida p^i, q_i : $i = 1,2,3,...,s$ lar olinishi kerak, bunda fazoviy fazo $2s = 6N$ o'lchamli matematik fazoga aylanadi. N ta zarrachali sistemani xarakterlash uchun $6N$ ta umumlashgan koordinatlarni va impulslarni aniqlashimiz kerak, bu esa mana shu $6N$ o'lchamli fazaviy fazodagi bitta nuqtaga mos keladi. Demak, fazaviy fazodagi ***har bir nuqta*** - N zarrachali sistemaning ***bitta holatiga mos*** kelar ekan. Vaqt o'tishi bilan sistemaning holati o'zgara boshlaydi, shunga yarasha $p^i(t)$, $q_i(t)$ lar ham o'zgara boshlaydi, sistemaga mos keluvchi nuqta qandaydir egri chiziqni chiza boshlaydi.

Sistemani bir nechta qismsistemalarga parchalaylik. Har bir qismsistemadagi arrachalarning sonini juda katta deymiz. Bu qismsistemalar o'zaro juda murakkab ta'sirda bo'ladi, ammo o'zaro ta'sirning kuchi kichik deb hisoblanishi kerak. Buni quyidagicha tushunish mumkin: qismsistemalar ularning sirtlari orqali o'zaro ta'sirlashadi, agar qismsistemaga N ta zarracha kirgan bo'lsa uning sisrtida $\sim N^{2/3}$ ta zarracha joylashgan bo'ladi, demak, o'zaro ta'sirda har bir molekulaga ikkinchi qismsistema tomonidan ta'sir qilayotgan kuch $\sim N^{2/3}/N \sim N^{-1/3}$ ga proportsional bo'ladi. Bu esa juda kichik sondir. Ammo, oqibat natijada mana shu juda kichik kuch o'zaro muvozanat o'rnatilishiga olib keladi.

Fazaviy fazoga mos keluvchi hajmni Γ deb belgilaylik, ya'ni, p^i va q_i lar qabul qilishi mumkin bol'gan hamma qiymatlarni qabul qilib chiqsa ular egallagan hajm shu Γ ga teng bo'ladi. Fazoviy fazoda (shu Γ ning ichida yotgan) kichik hajm elementini kiritaylik:

$$\Delta\Gamma = \Delta p \Delta q = \prod_{i=1}^{s} \Delta p^i \Delta q_i.$$

Bu hajm qismsistema impuslarining p^i, $p^i + \Delta p^i$ oraliqda va koordinatlarining q_i, $q_i + \Delta q_i$ oraliqda o'zgarishiga ms kelsin. Ko'rilayotgan qismsistemaga mos keluvchi nuqta o'zining harakati davomida Γ ning ichida harakat qilib mana shu $\Delta\Gamma$ ning ichiga ham kirib-chiqib yuradi. Faraz qilaylik, T vaqt ichida qismsistema $\Delta\Gamma$ ning ichida Δt vaqt davomida kuzatilgan bo'lsin. Qismsistemani $\Delta\Gamma$ ichida topish extimolliga sifatida quyidagini qabul qilamiz:

$$\Delta w = \lim_{T\to\infty} \frac{\Delta t}{T}. \tag{1.4}$$

Tushunarliki, muvozanatdagi sistemalar uchun w vaqtga oshkora bog'liq bo'lmaydi. Albatta, bu extimollik $\Delta\Gamma$ ga proporsional bo'lishi kerak - $\Delta\Gamma$ qancha katta bo'lsa qismsistemani uning ichida topish extimolliga ham shuncha katta bo'ladi:

$$\Delta w = \rho(p, q)\Delta\Gamma.$$

Cheksiz kichiklarga o'tsak

$$dw = \rho(p, q)d\Gamma = \rho(p^1, p^2, ..., p^s; q_1, q_2, ..., q_s) \prod_{i=1}^{s} dp^i dq_i. \tag{1.5}$$

Paydo bo'lgan proporsionallik koeffisienti $\rho(p,q)$ *(fazaviy) taqsimot funksiyasi* deyiladi. Albatta

$$\int_{\Gamma} dw = \int_{\Gamma} \rho(p^1, p^2, ..., p^s; q_1, q_2, ..., q_s) \prod_{i=1}^{s} dp^i dq_i = 1$$

bo'lishi kerak. Bu - qismsistemaning hamma holatlarda bo'lish extimolligining yig'indisa birga teng bo'lishi kerakligini bildiradi. Ixtiyoriy kattalikning o'rtacha qiymati quyidagicha aniqlanadi:

$$\bar{f} = \int f(p,q)\rho(p,q)dpdq = \int f(p,q)dw. \qquad (1.6)$$

Bundan keyin $\prod_{i=1}^{s} dp^i dq_i$ ning o'rniga ko'pincha $dpdq$ deb ketaveramiz.

(1.5)-dan kelib chiqadiki,

$$\rho(p,q) = \frac{dw}{d\Gamma}$$

fazaviy fazodagi extimollik zichligi ekan. Bu - ***mikroskopik xolatlarning*** extimollik zichligidir, chunki $\{p, q\} = \{p_1, p_2, ..., p_N, q_1, q_2, ..., q_N\}$ larning bitta qiymatiga bitta mikroskopik xolat to'g'ri keladi. Statistik fizikada makrosistemani unga mos keluvchi bor-yo'g'i bir nechta makroskopik kattaliklar (bosim, temperatura va h.k.) orqali ifodalashimiz kerak, bitta makroskopik holatga bir nechta mikroskopik holatlar mos keladi odatda.

Bunga oddiy misol: sistema ikkita ossillatordan iborat bo'lsin, sistemaning makroskopik holati shu sistemaning energiyasi orqali ifodalanadi (buni keyin isbot qilamiz), mikroskopik holat esa har bir ossillatorning qanday holatda turganligi bilan aniqlanadi. Masalan, sistemaning to'liq ichki energiyasi $4\hbar\omega$ ga teng bo'lsin. Bu makroholatga nechta mikroholatlar mos keladi? Har bir ossillatorning holati uning kvant soni n bilan aniqlanadi. To'liq energiya $E = 4\hbar\omega$ bo'lsa, har bir ossillatorning energiyasi $\varepsilon_i = \hbar\omega(n_i + \frac{1}{2})$, $i = 1, 2$ bo'lsa, berilgan bitta makroskopik holatga quyidagi mikroskopik holatlar mos keladi: $n_1 = 0, n_2 = 3; n_1 = 1, n_2 = 2; n_1 = 2, n_2 = 1; n_1 = 3, n_2 = 0$.

O'rtacha kattaliklar haqida gap ketar ekan, statistik fizikaning qonuniyatlari extimollik xarakteriga ega ekanligi kelib chiqadi. Buning sababi tushunarli - masalani aniq yechib chiqish (sistemadagi har bir zarrachaga mos keluvchi differencial tenglamani yechib chiqish) o'rniga statistik taqsimot funksiyasi yordamida o'rtachalarni aniqlashga o'tdik, albatta, bunda sistemaga tegishli informatsiyaning ma'lum bir qismini boy bergan bo'lamiz, natijada aniq kattaliklar o'rniga taqsimot funksiyasi orqali aniqlangan o'rtacha kattaliklarga o'tamiz.

Biz muvozanat holatida turgan sistemalarni o'rganamiz. Bu degani, mana shu sistemaning biror bir kattaligi (yetarli darajadagi) uzoq vaqt ichida kuzatilsa u o'zining o'rtacha qiymatiga teng $f = \overline{f}$ bo'lib chiqadi, bu o'rtachadan chetga chiqish juda kichik songa teng bo'ladi.

Biron bir qismsistema sistemaning boshqa qismlari bilan asosan o'zining sirti yaqinidagi zarrachalar orqali ta'sirlashadi, qismsistemadagi zarrachalar soni oshganda uning sirtida joylashgan zarrachalar sonining hissasi kamaya boshlaydi. Natijada, sirt atrofidagi zarrachalarning qismsistemaning to'liq ichki energiyasiga qo'shgan hissasi ham kamaya boshlaydi.

Buni quyidagicha ko'rish mumkin. Qismsistemada N ta zarracha bo'lsin, bunda uning sirtida $\sim N^{2/3}$ ta zarracha bo'ladi, sirtidagi zarrachalar sonining hamma zarrachalar soniga nisbati $\sim N^{-1/3}$ ga teng va N juda katta bo'lganda (statistik fizikadagi holda) tashqi qismsistemalar tomonidan qismsistemaga kirgan har bir zarrachaga mos keluvchi ta'sir juda kichik bo'ladi.

Shu nuqtai nazardan qismsistemalarni ***kvaziberk*** (deyarli berk) sistema deb qarash mumkin. Ammo bunday qarash faqat kichik vaqt davomida o'rinli bo'lib vaqt o'tishi bilan juda murakkab bo'lgan qismsistemalar orasidagi mana shu o'zaro ta'sir oqibat natijada sistemaning hamma hossalarini aniqlab beradi.

Qismsistemalarni kvaziberk deb qaraymiz, ya'ni, ular orasidagi o'zaro ta'sir juda kichik bo'lib, ularning bir-biriga ta'sirini hisobga olmasak ham bo'ladi. Ya'ni, bir qismsistema qandaydir holatda turgan bo'lsa bu holat boshqa qismsistemalarga ta'sir qilmaydi. Bir qismsistemaning taqsimoti ikkinchi qismsistemaning taqsimotiga bog'liq bo'lmasligini quyidagicha ifoda qilish mumkin:

$$\rho_{12} = \rho_1 \rho_2, \tag{1.7}$$

bu yerda ρ_1 va ρ_2 - birinchi va ikkinchi qismsitemalarning taqsimot funsiyalari, ρ_{12} esa mana shu ikkita qismsistemadan iborat bo'lgan sistemaning taqsimot funksiyasi. Yana bir qaytaramiz, (1.7)-formula faqat cheklangan (kichik) vaqt ichida o'rinlidir, vaqt o'tishi bilan qismsistemalarning mana shu o'zaro ta'siri sistemani muvozanat holatiga olib keladi.

Quyidagi mashqlarni yechishdan oldin Ilovadagi I.5-qismni o'qib chiqing.

1.1-mashq. Klassik zarracha kengligi a bo'lgan cheksiz chuqur o'raning ichida harakat qilayapti: $0 < x < a$. Zarrachaning $(x, x + dx)$ intervalda topish extimolligini toping.

1.2-mashq. Bir biridan mustaqil bo'lgan ikkita x va y kattaliklarning ko'paytmasining o'rtacha qiymati o'rtacha qiymatlarning ko'paytmasiga tengligini ko'rsating: $\overline{xy} = \overline{x} \cdot \overline{y}$.

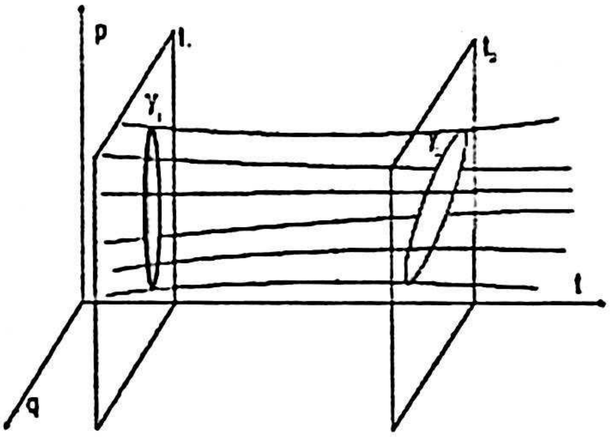
1.3 Liuoville teoremasi

N ta zarrachadan iborat sistemani ko'raylik. Unga mos keluvchi erkinlik darajalari soni va fazaviy fazo o'lchamligi $6N$ ga teng, ya'ni, fazaviy fazoda bu sistemaga bitta nuqta mos keladi. Vaqt o'tishi bilan bu nuqta fazaviy fazoda ma'lum bir traektoriyani - harakat traektoriyasini - chizib chiqadi. Bu traektoriya Hamilton tenglamalari

$$\dot{\mathrm{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathrm{q}^i}, \qquad \dot{\mathrm{q}}^i = \frac{\partial H}{\partial \mathrm{p}_i}, \qquad i = \overline{1 \ldots N} \tag{1.8}$$

ning yechimlari orqali aniqlanadi. Bitta boshlang'ich shartlarga (masalan, $t = 0$ vaqtda $p_i(0) = p_{i0}$, $q_i(0) = q_{i0}$ berilgan bo'lsin) bitta yechim mos keladi, ya'ni, bitta boshlang'ich nuqta p_{i0}, q_{i0} dan bitta chiziq chiqadi. Sistemaga mos keluvchi dinamika fazaviy fazoda mana shu bitta chiziq orqali tasavvurlanadi. Endi faraz qilaylik, sistemaga mos keluvchi hamma boshlang'ich holatlar fazaviy fazoda bitta $\Delta\Gamma_0 = \Delta\Gamma(p_0, q_0)$ sohani hosil qilsin. Bu holda bu sohaning har bir nuqtasidan mos keluvchi traektoriya boshlanishi kerak. Bu traektoriyalar to'plami - dastasi - ***fazaviy, yoki, statistik, ansambl*** deyiladi. Bu chiziqlar o'zaro kesishmaydi - harakat tenglamasining har bir yechimi ma'lum bir boshlang'ich shartlarga bo'ysunadi, bitta boshlang'ich shartga bitta yechim (chiziq) mos keladi. Yechim yagona bo'lgani uchun bu chiziqlar kesishmaydi[1]. Ma'lum bir vaqt t da $\mathrm{p}_i(t)$, $\mathrm{q}^i(t)$ lar ($\mathrm{p}_i(0)$, $\mathrm{q}^i(0)$ larga bog'liq bo'lgan holda) ma'lum bir qiymatga ega, bu esa mana shu dastaning bir kesimiga mos keladi. 1.1-rasmda γ_1 kesimga t_1 vaqtdagi fazaviy fazo elementi (hajmi) $\Delta\Gamma(p(t_1), q(t_1))$ mos keladi, γ_2 kesimga esa t_2 dagi $\Delta\Gamma(p(t_2), q(t_2))$ mos keladi. Dastaga kirgan chiziqlar juda zich joylashgan bo'ladi, bu holda qandaydir

[1] Statistik ansamblni aniqlashning boshqacha yo'li ham bor – sistemaga mos keluvchi bitta traektoriyani olamiz, uni o'zaro intervali bir xil bo'lgan t_1, t_2, t_3,... vaqt momentlarida kesamiz, shu intervallarning ohirida sistema erishgan nuqtalarni A_1, A_2, A_3 va h.k. deb belgilaymiz va mana shu nuqtalarni boshlang'ich nuqtalar sifatida ko'ramiz. Ixtiyoriy katta vaqtni olsak bu nuqtalar qandaydir yetarli darajada zich to'plamni – ansamblni – tashkil qiladi.



1.1-rasm: Fazaviy fazodagi sistemaga mos keluvchi nuqtalarning vaqt bo'yicha rivojlanishi

bir vaqtdan boshqa bir vaqtgacha olingan traektoriyalar dastasi go'yoki bir "*suyuqlik oqimi*"dek ko'rinishga ega desak bo'ladi. Taqsimot funksiyasi $\rho(p,q)$ sistemani (p,q) nuqtada topish extimolligi zichligi edi, Shuning uchun oqimni tashkil qilgan bunday uzluksiz chiziqlar zichligi o'zining ta'rifi bo'yicha taqsimot funksiyasi $\rho(p,q)$ ga teng, oqim zichligi esa $\rho\mathbf{v}$ ga teng, bu yerda

$$\mathbf{v} = \{v_1, v_2, ..., v_{6N}\} = \{\dot{q}_1, \dot{q}_2, ..., \dot{q}_{3N}, \dot{p}_1, \dot{p}_2, ..., \dot{p}_{3N}\}. \quad (1.9)$$

Yana bir ta'kidlab ketaylik, ρ – $6N$ o'lchamli fazaviy fazodagi oqimni tashkil qilgan nuqtalar (extimolliklar) zichligi, $\mathbf{v}$ - bu $6N$ o'lchamli fazaviy fazodagi tezlik vektori, $\rho\mathbf{v}$ - esa $6N$ o'lchamli fazaviy fazodagi oqim zichligi.

Bir o'lchamli fazaviy traektoriyalarga misollar keltiraylik.

1.1-misol. Energiyasi E bo'lgan bir o'lchamli chiziqli ossillatorga quyidagi Hamiltonian mos keladi:

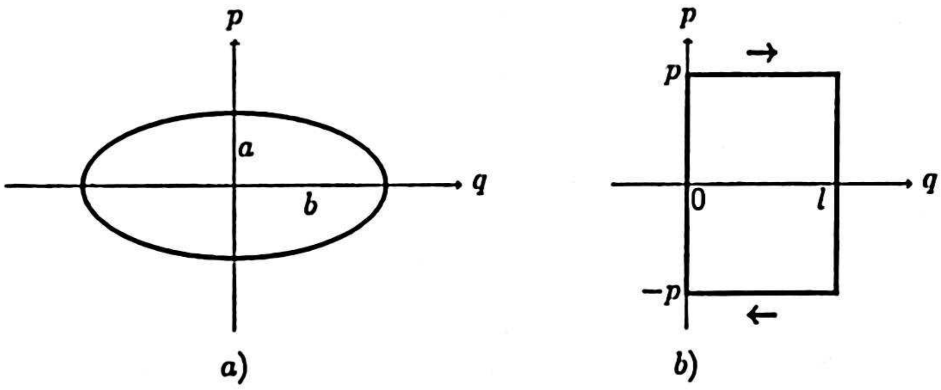
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = E.$$

Bu ifodani

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{(2E/m\omega^2)} = 1$$

ko'rinishda yozib olamiz. Erkinlik darajasi birga teng bo'lgan sistemaga 2-o'lchamli fazaviy fazo mos keladi, bu fazoning o'qlari - p va q. Shu fazoda yuqoridagi tenglama ellipsni ifodalaydi, u 1.2-rasmning (a) qismida ko'rsatilgan. Ellipsning o'qlari $a = \sqrt{2mE}$ va $b = \sqrt{2E/m\omega^2}$. Energiyasi E bo'lgan ossillatorga ixtiyoriy vaqtda mana shu ellipsning ustidagi bir nuqta mos keladi. Energiyasi 0 dan E gacha bo'lgan ossillatorga mos keluvchi fazaviy fazo elementi mana shu ellipsning sirt yuzasiga teng: $\Delta\Gamma = \pi ab = 2\pi E/\omega$.

1.2-misol. q o'qi bo'yicha $(0,l)$ intervalda (0 va a koordinatali devorlar orasida) 0 dan o'ngga $+p$ impuls bilan, l nuqtadagi devorga elastik urilgandan keyin chapga $-p$ impuls bilan harakat qilayotgan nuqtaviy zarrachaning fazaviy traektoriyasi 1.2-rasmning (b) qismida berilgan. Bu holda $\Delta\Gamma = 2pl$.



1.2-rasm: a) chiziqli ossillatorning fazaviy traektoriyasi; b) ikki devor orasidagi bir o'lchamli harakat.

Fazaviy fazodagi oqim (fazaviy ansambl) ni suyuqlik oqimi deb tasavvur qilaylik. Bunday suyuqlik ***siqilmaydigan suyuqlik*** ekanligini isbot qilish mumkin. Gidrodinamikadan ma'lumki, uch o'lchamli fazoda suyuqlikning siqiluvchanmasligining sharti

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{y}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{z}}{\partial z} = 0$$

ko'rinishga ega. $6N$ o'lchamli fazaviy fazodagi suyuqlik uchun esa tezlikning divergensiyasi Hamilton tenglamalari (1.8) natijasida

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0 \qquad (1.10)$$

ga teng bo'ladi. Demak, fazaviy oqim uzluksiz siqilmaydigan suyuqlikning oqimi sifatida ko'rilishi mumkin.

Dastaga kirgan chiziqlar uzilmaydi. Ya'ni, vaqt o'tishi bilan dastadagi nuqtalar soni o'zgarmaydi, demak, ularning zichligi $\rho(p, q)$ uzluksizlik tenglamasiga bo'ysunadi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0.$$

Bu yerdagi ikkinchi hadni ochaylik:

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = \rho \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho.$$

Hosil bo'lgan birinchi had (1.10)-bo'yicha nolga teng, ikkinchi had esa (1.9) bo'yicha

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \rho = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i \right)$$

ko'rinishga ega. Natijada uzluksizlik tenglamasi quyidagi ko'rinishga keladi:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\dot{p}_i+\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)=0.$$

Kanonik tenglamalar (1.8)-ni olingan tenglamaga qo'llasak

$$\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\dot{p}_i+\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\dot{q}_i\right)=\sum_i\left(\frac{\partial\rho}{\partial \mathrm{q}_i}\frac{\partial H}{\partial \mathrm{p}_i}-\frac{\partial\rho}{\partial \mathrm{p}_i}\frac{\partial H}{\partial \mathrm{q}^i}\right)=\{H,\rho\}$$

ekanligi kelib chiqadi. Boshqa so'z bilan aytganda

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t}=\{\rho,H\}} \tag{1.11}$$

ekan. Bu - klassik taqsimot funksiyasining "harakat tenglamasi". Undan taqsimot funksiyasi ρ ning harakat integrali ekanligini kelib chiqadi:

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\{H,\rho\}=0.}$$

Haqiqatda, muvozanatda turgan sistema haqida gap ketar ekan boshidan $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}=0$ deb olish kerak edi, bu tenglikni hozir ham ishlatish kech emas.

Olingan natija Liouville teoremasining bir ko'rinishi ekanligiga ishonch hosil qilaylik. Liouville[2] teoremasi bo'yicha fazaviy fazoda tanlab olingan bir hajm kanonik almashtirish natijasida o'zgarmaydi. Harakat - kanonik almashtirishning hususiy holidir, shu sababdan sistemaning harakati davomida unga boshlang'ich shartlar orqali mos keltirilgan mos fazaviy fazo hajmi $\Delta\Gamma$ ning formasi o'zgarishi mumkin, ammo uning son qiymati o'zgarmaydi. Agar ixtiyoriy vaqtdagi fazaviy fazoning olingan hajmini $\Delta\Gamma(p(t),q(t))$ deb belgilasak Liouville teoremasi bo'yicha

$$\Delta\Gamma(p(t_1),q(t_1))=\Delta\Gamma(p(t_2),q(t_2))$$

bo'ladi. Bu hajmning ichidagi nuqtalar soni ham o'zgarmasdir. Demak, fazaviy fazodagi taqsimot zichligi ham o'zgarmasdir. Bu zichlik esa taqsimot funksiyasi $\rho(p,q)$ ning o'zidir. Demak,

$$\rho(p(t_1),q(t_1))=\rho(p(t_2),q(t_2)). \tag{1.12}$$

[2] Joseph Liouville (1809-1882) - buyuk fransuz matematigi. Rus tilida - Жозеф Лиувилль.

Olingan natija fazaviy oqimning yuqorida ko'rsatilgan siqiluvchanmasligiga mos keladi - siqiluvchanmas suyuqlikning zichligi ham o'zgarmas bo'ladi. Shuning o'zidan ham taqsimot funksiyasi ρ ning harakat integrali ekanligi ko'rinib turibdi.

1.3-mashq. Porshen silindr ichida kichik u tezlik bilan adiabatik ravishda harakat qiladi. Silindrning ichida bitta m massali molekula porshen va qo'zg'olmas devor orasida ularga elastik urilib harakat qilayapti. Uning uchun fazaviy xajm saqlanishini ko'rsating.

1.4-mashq. Massalari m_1 va m_2 bo'gan zarrachalar bir chiziq bo'yicha harakat qilib elastik to'qnashadi. Bu jarayonda Liouville teoremasining bajarilishini tekshiring.

1.4 Mikrokanonik taqsimot

Taqsimot funksiyasi $\rho(p,q)$ harakat integrali ekanligini topdik. (1.7)-dan kelib chiqadiki

$$\ln(\rho_{12}) = \ln\rho_1 + \ln\rho_2,$$

ya'ni, taqsimot funksiyasining logarifmi additiv harakat integrali ekan. Ammo bizga hamma additiv harakat integrallari ma'lum, ular ettitadir: $E, \mathbf{P}, \mathbf{M}$. Demak, sistemaning a-nchi qismsistemasi uchun

$$\ln\rho_a = \alpha_a + \beta_a E_a + \boldsymbol{\gamma}_a \cdot \mathbf{P}_a + \boldsymbol{\delta}_a \cdot \mathbf{M}_a \tag{1.13}$$

deb yozib olishimiz mumkin, bu yerda $\alpha_a, \beta_a, \boldsymbol{\gamma}_a, \boldsymbol{\delta}_a-$ qandaydir konstantalar, $E_a, \mathbf{P}_a$ va $\mathbf{M}_a$ lar esa shu qismsistemaning energiyasi, impulsi va harakat miqdori momentidir. α_a konstanta norma sharti $\int \rho_a d\Gamma_a = 1$ dan topiladi, qolgan yettita konstantalar esa $-\beta_a, \boldsymbol{\gamma}_a, \boldsymbol{\delta}_a-$ yuqoridagi yettita harakat integralining berilgan qiymatlari orqali aniqlanishi mumkin.

Olingan natija (1.13)-ning ahamiyati katta - ***makroskopik sistemaning statistik hossalari faqatgina uning energiyasi, impulsi va harakat miqdori momentigagina bog'liq ekan.*** Ya'ni, mana shu yettita parametr sistemaga kirgan o'ta katta sondagi molekulalarning o'ta katta sondagi xarakteristikalarining o'rnini bosar ekan.

ρ ning o'zini aniqlaylik. Harakat integrallari uchun

$$E(p,q) = E_a, \qquad \mathbf{P}(p,q) = \mathbf{P}_a, \qquad \mathbf{M}(p,q) = \mathbf{M}_a \tag{1.14}$$

shartlar $2s$ o'lchamli fazaviy fazodagi yettita shartdir, bu shartlar $\int \rho\, dpdq = 1$ dagi integrallashni shu fazodagi $2s-7$ o'lchamli gipersirt bo'yicha integrallashga keltiradi. Taqsimot funksiyasi ρ (1.14)-shartlar bo'yicha fazaviy fazoning faqatgina mana shu $2s - 7$ o'lchamli gipersirti ustida yotgan nuqtalaridagina noldan farqdir, bitta nuqtadagina noldan farq qilgan funksiyadan olingan integral noldan farq qilishi uchun bu funksiya mana shu nuqtada cheksizlikka teng bo'lishi kerak. Bu degani taqsimot funksiyasi quyidagi ko'rinisga ega bo'lishi kerak:

$$\rho_a = \text{const}\,\delta(E - E_a)\,\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}_a)\,\delta(\mathbf{M} - \mathbf{M}_a). \tag{1.15}$$

Topilgan taqsimot funksiyasining nomi - ***mikrokanonik taqsimot***.

Sistemaning impulsi va momenti uning bir-butunligicha harakati bilan bog'liqdir. Statistik fizikada ko'pincha masala quyidagicha qo'yilgan deb qaraladi: sistema bir yaschikda berilgan, uni mana shu yaschik bilan bog'langan koordinat sistemasida ko'ramiz. Bu degani, sistemaning impulsi va impuls momenti umuman masalaning qo'yilishidan chiqarib tashlanadi. Natijada mikrokanonik taqsimot (1.15)-ning o'rniga quyidagi ko'rinishga keltiriladi:

$$\boxed{\rho_a = \text{const}\,\delta(E - E_a).} \tag{1.16}$$

Impuls momenti sistemaning statistik hossalariga qanday ta'sir qilishi - ???mashqda ko'rilgan.

Topilgan mikrokanonik taqsimot funksiyasidan bitta juda muhim hulosa kelib chiqadi - muvozanat holatida turgan makroskoipik sistemaning statistik hossalari faqat uning energiyasiga bog'liq ekan.

Ya'na bir aniqlik kiritaylik. Ohirgi formulalardagi energiya E bir son emas, haqiqatda E harfi orqali sistemaning Hamilton funksiyasi $E = H(p, q)$ ko'zda tutiladi. Uni E deb belgilashning sababi shuki, har bir (p, q) ga energiyaning ma'lum qiymati to'g'ri keladi deb olinadi.

Mikrokanonik taqsimot shunday sistemaga mos keladiki, u sistema teng xuquqli, o'zaro ta'sirlashmaydigan va aniq energiyaga ega bo'lgan qismsistealardan iborat bo'lgan bo'lishi kerak. Albatta, ixtiyoriy sistega kirgan qismsistemalar vaqt o'tishi bilan o'zaro ta'sirlasha boshlaydi, shu sababdan mikrokanonik taqsimotning qo'llash vaqti uzoq bo'lmasligi kerak.

1.5 Statistik matritsa

Statistik fizikaning fundamental qonunlari (fizikaning boshqa hamma sohalaridagidek) kvant harakterga ega.

Katta sonli sistemalarda kvant satxlari juda zich joylashgan bo'ladi. Natijada makrojism aniq statsionar holatda bo'lishi deyarli mumkin emas. (Masalan, N ta atomli gazni ko'z oldingizga keltiring, N juda katta bo'lsin, har bir atom cheksiz ko'p holatlarda bo'lishi mumkin, N ta atomning mumkin bo'lgan holatlari taqsimoti deyarli cheksiz kombinatsiyalarga keltiriladi, natijada sistemadagi energetik satxlarning farqi o'ta kichik bo'ladi. U 10^{-N} ga proportsional bo'lishini ko'rsatish mumkin.) Tashqi jismlar bilan har qanday o'zaro ta'sir energiyasi satxlar aro energiyaga nisbatan juda katta bo'ladi. Bundan tashqari, noaniqlik prinsipi bo'yicha satx energiyasining noaniqligi $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ bo'ladi, bu yerda Δt - kuzatish davri. Kvant noaniqlik $\Delta E \rightarrow 0$ bo'lishi uchun $\Delta t \rightarrow \infty$ bo'lishi kerak. Bulardan kelib chiqadiki, makrosistemaning aniq statsionar holati haqida gapirish deyarli mumkin emas.

Kvant mexanikasidan ma'lumki, to'lqin funksiyaga ega bo'lish uchun sistema toza (sof) holatda turgan bo'lishi kerak, ya'ni, u (sistema) boshqa bir katta sistemaning bir kichik qismi bo'lmasligi kerak. Boshqa bir sistemaning bir qismi bo'lgan sistema to'lqin funksiyasiga ega bo'lmaydi. Bizning asosiy g'oyamiz esa har qanday sistemani kichik qismsistemalarga parchalab o'rganish. Undan tashqari, sistemaga kirgan har bir zarrachaga tegishli boshlang'ich shartlar berilgan bo'lishi kerak. Makrosistemalarda bularning ilojisi yo'q, ya'ni, makrosistemadagi har bir zarrachaning aniq boshlang'ich shartlarga bo'ysinuvchi to'lqin funksiyasi bor deb qaray olmaymiz. Bu degani makrosistemani o'rganganda zichlik matritsasiga o'tish kerak deganidir.

Zichik matritsasini kiritishni eslaylik. Makrosistemaning bir qismsistemasini olaylik, uni boshqa hech qanday qismlar bilan o'zaro ta'sirda emas va qandaydir ma'lum n-holatda (n - sistemaning hamma kvant sonlarini o'z ochiqa olsin) turishi mumkin deb olamiz. Faraz qilaylik, shu qismsistema qandaydir to'liq ifodalanadigan va $\psi(q)$ to'lqin funksiyali ega bo'lgan kvant holatda turibdi. Bu holda shu qismsistemaning to'lqin funksiyasi hususiy funksiyalar to'liq sistemasi bo'yicha qatorga yoyiladi:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x).$$

Bu yerda $c_n(t)$ - t vaqt momentida sistemani $n-$ holatda topish extimolligining amplitudasi, $H\psi_n = E_n\psi_n$. Ixtiyoriy f kattalikning o'rtachasi shu kattalikka mos keluvchi operator $\hat{f}$ orqali quyidagicha aniqlanadi:

$$\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_m^*(t)c_n(t)\langle\psi_m|\hat{f}\,|\psi_n\rangle = \sum_{n,m} c_m^*(t)c_n(t)f_{mn}.$$

Sistema sof (to'liq ifodalanadigan) holatlarda bo'lmas ekan, uning uchun c_n koefficientlar ham mavjud bo'lmaydi. Ammo $c_m^*(t)c_n(t) \to w_{nm}$ almashtirish orqali ***zichlik matritsasi***, yoki, ***statistik matritsa*** kiritilsa yuqoridagi o'rtachani quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\bar{f} = \sum_{n,m} w_{nm} f_{mn}.$$

Bu o'rtacha to'liq ma'nodagi o'rtacha sifatida tushuniladi, ya'ni, unga statistik va kvant holatlar bo'yicha o'rtalashtirish kiritilgan. Kiritilgan statistik matritsa $\hat{w}$ faqat (kvantmexanik ma'nodagi) to'liq ifodalanadigan (sof) holatlardagina $c_m^*c_n$ ko'paytmaga keltiriladi. Sof holatda $|c_n|^2$ qismsistemani $n-$ holatda topish extimolligi edi, shuning uchun $w_{nn} = w_n$ ni ***sistemani n-holatda topish extimolligi*** deb qabul qilamiz. Shunga yarasha

$$\sum_n w_n = 1$$

bo'lishi kerak. Ko'rinib turibdiki, statistik matritsa klassik taqsimot funksiyasining analogi ekan, kvant hollarda taqsimot funksiyasining o'rniga statmatritsani ishlatishimiz kerak. Sof holatlar uchun $c_n(t) \sim e^{-iE_nt/\hbar}$ ekanligini hisobga olib

$$\frac{\partial}{\partial t}c_m^*(t)c_n(t) = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)c_m^*(t)c_n(t)$$

ga kelamiz. Buni umumlashtiramiz:

$$\frac{\partial}{\partial t}w_{nm} = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)w_{nm}.$$

Operator formasiga o'tish uchun quyidagilarni hisobga olamiz:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \Rightarrow \quad \psi_m^*\hat{H}\psi_n = H_{mn} = E_n\delta_{nm};$$

$$(\hat{w}\hat{H})_{nm} = \sum_k w_{nk}H_{km} = \sum_k w_{nk}E_m\delta_{km} = w_{nm}E_m;$$

$$(\widehat{H}\widehat{w})_{nm} = \sum_k H_{nk}w_{km} = \sum_k E_k\delta_{kn}w_{km} = E_n w_{nm}.$$

Yuqoridagi to'rtta formulalardan statistik matritsa $\widehat{w}$ uchun quyidagi harakat tenglamasi kelib chiqadi:

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{w} = \frac{i}{\hbar}(\widehat{w}\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{w}) = \frac{i}{\hbar}[\widehat{w}, \widehat{H}]. \tag{1.17}$$

Bu tenglama klassik taqsimot funksiyasi ρ uchun tenglama (1.11) ning kvant analogidir.

Muvozanat holatidagi sistemalar uchun taqsimot funksiyasi va, shunga yarasha, statistik matritsa vaqtga oshkora bog'liq bo'lmaydi, shuning uchun

$$[\widehat{w}, \widehat{H}] = 0$$

bo'lishi kerak. Demak, $\widehat{w}$ - operatorining hususiy qiymatlari harakat integrallari ekan. Bu - klassik Liouville teoremasining analogi.

Harakat integrali, ya'ni, Hamiltonian bilan o'zaro kommutativ operator, Hamiltonian bilan bir vaqtda diagonal ko'rinishga keltiriladi. Bu degani w_{nm} matritsa diagonal matritsa bo'lishi kerak: $w_{nm} = \delta_{mn}w_n \Rightarrow w_{nn} = w_n$. Sunga yarasha ixtiyoriy fizik kattalik f ning o'rtacha qiymati

$$\overline{f} = \sum_n w_n f_{nn}$$

bo'lib chiqadi. Bu formulani "Fazaviy fazo va taqsimot funkiyasi" paragrafidagi (1.3) formula bilan solishtiring - ularning ma'nosi birdir.

Harakat integrali sifatida w_n faqatgina boshqa harakat integrallari orqali ifodalanadi. Klassik taqsimot funksiyasiga qo'llanilgan mulohazalarni eslab

$$\boxed{\ln w_n = \alpha_n + \beta_n E_n}$$

deb olish mumkin (har bir qismsistema uchun).

Kvant makrosistemalardagi satxlarning deyarli uzluksizligini hisobga olib $d\Omega(E)$ tushuncha kiritaylik. Bu - $(E, E + dE)$ energiya intervalidagi kvant holatlar soni. Klassik statistika bilan solishtirilsa $d\Omega(E) \sim d^s p\, d^s q$ bo'ladi. Sistema o'zaro ta'sirda bo'lmagan qismsistemalarga bo'linsa

$$d\Omega = \prod_a d\Omega_a$$

bo'ladi. Buni tushunish oson – ikkita qismsistemadan iborat bo'lgan sistema berilgan bo'lsin. Ikkala qismsistema mustaqil bo'lgani uchun 1-qismsistemadagi holatlar 2-qismsistemadagi holatlarga ta'sir qilmaydi, demak, bir qismsistemaning biron holatiga ikkinchi qismsistemaning ixtiyoriy holatlari to'g'ri kelar ekan. Shu bilan umumiy holatlar soni uchun yuqoridagi formulaga kelamiz. Taqsimot funksiyasi $\rho(p,q)$ ga qo'llagan mulohazalarni qaytarsak

$$\boxed{dw = \mathrm{const}\,\delta(E_0 - E)\prod_a d\Omega_a} \tag{1.18}$$

ekanligini olamiz. Bu - mikrokanonik taqsimotning kvant ko'rinishi.

Bu formulaga izoh berish kerak. Bu formuladagi E_0 – sistemaning to'liq energiyasi (aniq son), E – esa o'zgaruvchi, agar qismsistemalarning soni n bo'lsa u shu qismsistemalarning energiyasining yig'indisiga teng:

$$E = E_1 + E_2 + \cdots + E_n. \tag{1.19}$$

Integrallash meyyori esa

$$\prod_a d\Omega_a = d\Omega_1 d\Omega_2 \cdots d\Omega_n$$

ko'rinishga ega. Har bir qism sistemaning energiyasi o'zgarib turishi mumkin (o'zaro ta'sir natijasida), ammo (1.19)-tenglik bajarilishi kerak.

Shuni aytish kerakki, muvozanat holatida turgan makroskopik sistemaning energiyasi o'zining o'rtacha qiymatidan deyarli farq qilmaydi. Keyin ko'rsatamizki, N ta zarrachali sistemada energiyaning (ixtiyoriy boshqa makroskopik kattalikning ham) nisbiy fluktuatsiyasi $\delta E \sim 1/\sqrt{N}$ ko'rinishga ega bo'ladi. Statistik fizikada o'rganiladigan sistemalar uchun odatda $N \sim 10^{19} \div 10^{23}$ bo'ladi. Bundan ko'rinib turibdiki, taqsimot extimolliga $w(E)$ energiyaning o'rtacha qiymatida keskin maksimumga ega bo'lgan funksiyadir, bu o'rtacha qiymatdan ozgina chetlashinsa u keskin ravishda nolga intiladi.

1.6 Entropiya

Makroskopik sistemalarda energetik satxlar juda zich joylashgan bo'ladi. Energiya 0 dan E gacha o'zgargandagi holatlarning to'liq sonini $\Omega(E)$ deb belgilaylik. Unda $d\Omega(E)/dE$ holatlarning spektral zichligi bo'ladi, $(E, E +$

dE) intervaldagi holatlarning soni esa $d\Omega = \dfrac{d\Omega(E)}{dE}dE$ bo'ladi. $w_n = w(E_n)$ qismsistemani n-holatda topish extimolligi, uni (n indcksni yozmay turaylik) $d\Omega(E)$ ga ko'paytirsak hosil bo'lgan $w(E)d\Omega(E)$ qismsistemani uning energiyasi $(E, E + dE)$ intervaldagi holatda topish extimolligi bo'ladi. Tushunarliki,

$$\int w(E)d\Omega(E) = 1.$$

Aytganimizdek, $w(E)-$ juda o'tkir cho'qqilik funksiya, u faqatgina qandaydir o'rtacha qiymat $\overline{E}$ dagina noldan farqlidir, $\overline{E}$ ning atrofida noldan sezilarli farq qilmaydi. Bu integralni quyidagicha yozib olib

$$\int w(E)\frac{d\Omega(E)}{dE}dE = \int W(E)dE$$

shunday ΔE ni tanlab olaylikki, uning $W(\overline{E})$ ga ko'paytmasi birni bersin:

$$W(\overline{E})\Delta E = w(\overline{E})\frac{d\Omega(\overline{E})}{dE}\Delta E = w(\overline{E})\Delta\Omega(\overline{E}) = 1.$$

Qaytaramiz, $w(E)$ energiyaning o'rtacha qiymati $\overline{E}$ da juda keskin maksimumga ega bo'lgan funksiyadir, $w(\overline{E})$ - shu funksiyaning o'zining maksimumidagi qiymati. Paydo bo'lgan $\Delta\Omega(\overline{E}) = (d\Omega/dE)\Big|_{E=\overline{E}}\Delta E$ mana shu o'rtacha energiya $\overline{E}$ lik makroskopik holatga mos keluvchi mikroholatlar soni. Bu kattalik $\overline{E}$ satxning ***statistik vazni*** deyiladi.

Klassik statistikada bu munosabatning o'rniga

$$\rho(\overline{E})\Delta p\Delta q = 1$$

deb yozish kerak. Bu yerdagi $\Delta p\Delta q$ – fazoviy fazoning $\overline{E}$ energiya atrofidagi ΔE energiyaga mos keluvchi qismidir. Fazaviy fazoning elementi bo'lgan $\Delta p\Delta q$ va kvant mikroholatlar soni bo'lgan $\Delta\Omega$ orasidagi bog'lanish quyidagi ko'rinishga ega:

$$\Delta\Omega = \frac{\Delta p\Delta q}{(2\pi\hbar)^s}. \tag{1.20}$$

Kvant mexanikasida bir o'lchamli sistemaning har bir holatiga fazaviy fazoda $2\pi\hbar$ hajmli ***katak*** mos kelishi isbot qilinadi. s erkinlik darajasiga ega bo'lgan sistema uchun har bir holatga $(2\pi\hbar)^s$ hajm mos keladi. Bu hajm ***elementar hajm*** deyiladi. Fazaviy fazoda bundan kichik hajm haqida gapirish mumkin emas, bu - Heisenbergning noaniqlik prinsipidan kelib chiqadigan hulosalardan biri. Heisenberg bo'yicha $\Delta p \Delta q \sim \hbar$ dan kichik bo'la olmaydi, yani, fazaviy fazoning $\hbar$ katagining ichidagi nuqtalarni har xil holatlarga mos keladi deb ajratishga haqqimiz yo'q, ularning extimolligi bir xil bo'lishi kerak. Shuning uchun fazaviy fazo hajm elementi $\Delta p \Delta q$ ga mos keluvchi kvant holatlar soni yuqoridagi (1.20) formula orqali ifodalanadi. Bu formulaning umumiy isboti juda murakkabdir shuning uchun biz uni isbotsiz keltiramiz.

Entropiya statistik fizikada juda muhim rol o'ynaydi va u quyidagi formula orqali kiritiladi:

$$S = \ln \Delta\Omega(E). \tag{1.21}$$

Bu formulada kvant mikroholatlar soni haqida gap ketayapti – ya'ni, E energiyali bitta makroskopik holatga qancha mikroskopik holatlar mos keladi.

Yuqoridagi formulalar bo'yicha

$$S = \ln \Delta\Omega = \ln \left(\frac{d\Omega(E)}{dE} \Delta E \right)$$

bo'lishi kerak, go'yoki ΔE ga bog'liqlik bordek ko'rinadi. Haqiqatda bunday bog'liqlik makrosistemadagi zarrachalar soni N juda katta bo'lganda nolga intiladi. Buni fluktuatsiyalar nazariyasi qismida ko'ramiz.

Klassik fizikada entropiyani faqatgina qandaydir konstanta aniqligidagina kiritish mumkin, faqatgina kvant mexanikasi bu konstanta nimaga tengligini beradi. Klassik fizikaga o'tsak (1.21)-ning o'rniga (1.20)-ni hisobga olib quyidagini yozish kerak:

$$S = \ln \frac{\Delta p \Delta q}{(2\pi\hbar)^s}. \tag{1.22}$$

Bu formuladan korinib turibdiki, entropiyaga faqatgina kvant mexanikasi doirasidagina aniq ta'rif berish mumkin.

Qismsistema uchun $\ln w_n = \alpha_n + \beta E_n$ ekanligini topgan edik, demak,

$$\ln w(\overline{E}) = \alpha + \beta \overline{E} = \langle \ln w(E_n) \rangle.$$

Demak,

$$S = \ln \Delta\Omega = -\ln w(\overline{E}) = -\sum_n w_n \ln w(E_n) = -\mathrm{Sp}\,(\widehat{w} \ln \widehat{w})\,.$$

Ixtiyoriy sistema uchun $\Delta\Omega = \prod_a \Delta\Omega_a$ bo'ladi, bundan hulosa - ***entropiya additiv kattalik*** ekan:

$$S = \ln \Delta\Omega = \ln \prod_a \Delta\Omega_a = \sum_a \ln \Delta\Omega_a = \sum_a S_a. \tag{1.23}$$

1.3-misol. Sistemaga 4-ta ossillator kiradi, har bir ossillatorning energetik satxlari $\varepsilon_i = \hbar\omega(n_i + 1/2)$ ga teng. Sistemaning to'liq energiyasi $E = 8\hbar\omega$ ga teng bo'lsin. Bu makroskopik holatga nechta mikroskopik holatlar mos keladi, ya'ni, $\Delta\Omega(8\hbar\omega)$ nimaga teng? Agar $E = 10\hbar\omega$ bo'lsachi? Ossillatorlarni bir-biridan ajratib bo'lmaydi deb qarang.

Masalaning sharti bo'yicha

$$2\hbar\omega + \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3 + n_4) = 8\hbar\omega,$$

yoki, $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 6$. Har bir n_i butun son (yoki nol) bo'lganda ularni necha xil yo'l bilan tanlab olish mumkinki ularning yig'indisi 6-ga teng bo'lsin (ossillatorlarni bir-biridan ajratish mumkin emasligini ham hisobga olish kerak)?

Masalani boshqacha qo'yish mumkin. Bizga to'rtta quti berilgan, oltita biri-biridan farq qilmaydigan sharlarni bu qutilar bo'yicha necha xil yo'l bilan joylashtirish mumkin? Kombinatorika fanidan ma'lumki, n ta bir xil jismlarni k ta qutilarga

$$C^n_{n+k-1} = \frac{(n+k-1)!}{n!(k-1)!} \tag{1.24}$$

yo'l bilan taqsimlash mumkin (Ilovada bu formula keltirib chiqarilgan). Bizning holda $n = 6$, $k = 4$, demak, $C^6_9 = 84$ yo'l bilan 6-ta bir-biridan farq qilmaydigan sharlarni 4-ta qutilarga taqsimlash mumkin. Shu bilan

$$\Delta\Omega(8\hbar\omega) = 84$$

ekan. Demak, to'rtta ossilatordan iborat va energiyasi $E = 8\hbar\omega$ ga teng bo'lgan makrosistemani (makroholatni) 84-ta mikroskopik kombinatsiyalar orqali hosil qilish mumkin ekan.

$E = 10\hbar\omega$ holga o'tamiz, yana o'sha 4-ta ossillator, ammo sistema bu galda boshqa makroholatda turibdi. Bu holatga necha mikroholatlar mos keladi, ya'ni, bu holatning statistik vazni nimaga teng? Oldingi holatdan farqli ravishda endi $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 8$ bo'lishi kerak. (1.24)-formulada $n = 8$, $k = 4$ deb olish kerak:

$$C^8_{11} = \frac{11!}{8!3!} = 165.$$

Demak, $\Delta\Omega(10\hbar\omega) = 165$ ekan.

Albatta, bu misollardagi zarrachalarning soni juda kichik, makrosistema tushunchasiga to'g'ri kelmaydi, shuning uchun bu hollarga entropiyani mos keltirishimiz qonuniy bo'lmaydi. Ammo, bu misollar $\Delta\Omega$ ni tushunishga yordam beradi degan umiddamiz.

Klassik fizikaga kelsak quyidagilarni yozib chiqishimiz mumkin:

$$\int \rho d\Gamma = 1 \quad \rightarrow \quad \rho(\overline{E})\Delta\Gamma = 1, \quad \Delta\Gamma = \Delta p \Delta q.$$

Bundan hulosa

$$S = \ln \frac{\Delta\Gamma}{(2\pi\hbar)^s}, \quad \frac{\Delta\Gamma}{(2\pi\hbar)^s} = \frac{1}{\rho(\overline{E})(2\pi\hbar)^s} = \left\langle \frac{1}{\rho(E)(2\pi\hbar)^s} \right\rangle.$$

Demak, klassik fizikadagi entropiyaning ta'rifi sifatida quyidagini olamiz:

$$S = -\langle \ln\left(\rho(E)(2\pi\hbar)^s\right)\rangle = -\int \rho \ln\left(\rho(E)(2\pi\hbar)^s\right) d\Gamma.$$

1.5-mashq. Bir o'lchamli garmonik ossillator uchun fazaviy fazo xajmini $\Gamma(E) = \int dp \int dq$ integralni hisoblash yo'li bilan toping. E energiyagacha bo'lgan holatlar soni $\Omega(E)$ ni va holatlar zichligi $D(\varepsilon)$ ni toping. $\Gamma/\Omega = ?$

1.6-mashq. Bir o'lchamli $0 \le x \le l$ sohada harakat qilayotgan energiyasi ε bo'lgan ozod a) klassik zarracha uchun fazaviy fazo hajmi $\Gamma(\varepsilon)$ ni; b) kvant zarracha uchun satxlar soni $\Omega(\varepsilon)$ ni va holatlar zichligi $D(\varepsilon)$ ni toping. $\Gamma/\Omega = ?$

Huddi shu masalani ikki va uch o'lchamli sohalarda harakat qilayotgan zarrachalar uchun ham yeching.

1.7 Entropiyaning o'sish qonuni

Mikrokanonik taqsimotni eslaymiz:

$$dw = \text{const}\,\delta(E - E_0) \prod_a d\Omega_a = \text{const}\,\delta(E - E_0) \prod_a \frac{d\Omega_a}{dE_a} dE_a.$$

Hosilaning ta'rifi bo'yicha

$$\frac{d\Omega_a}{dE_a} = \lim_{\Delta E_a \to 0} \frac{\Omega_a(E_a + \Delta E_a) - \Omega_a(E_a)}{\Delta E_a} = \lim_{\Delta E_a \to 0} \frac{\Delta\Omega_a}{\Delta E_a}.$$

Ammo, ΔE fizik sistema uchun o'zining fluktuatsiyasidan kam qiymatni qabul qila olmaydi, shu sababdan fizik aniqlikda

$$\frac{d\Omega_a}{dE_a} \simeq \frac{\Delta\Omega_a}{\Delta E_a}$$

deb olishimiz mumkin (to'g'rirog'i, kerak). Bu yerda $\Delta\Omega_a$ a-qismsistemaning E_a energiyaga mos keluvchi statistik vazni rolini o'ynaydi. Natijada

$$\frac{d\Omega_a}{dE_a} \simeq \frac{\Delta\Omega_a}{\Delta E_a} = \frac{1}{\Delta E_a} e^{S_a(E_a)} \tag{1.25}$$

formulaga kelamiz va undan quyidagini olamiz:

$$dw = \text{const}\,\delta(E - E_0) \prod_a \frac{d\Omega_a}{dE_a} dE_a = \text{const}\,\delta(E - E_0) \prod_a \frac{\Delta\Omega_a}{\Delta E_a} dE_a =$$

$$= \text{const}\, \delta(E - E_0) e^S \prod_a \frac{dE_a}{\Delta E_a}, \qquad S = \sum_a S_a.$$

ΔE_a lar kichik, ammo, chekli sonlardir, ularni konstantaning ichiga kiritib yuboramiz, chunki e^S juda tez o'suvchi funksiya, $\prod_a \Delta E_a$ esa deyarli o'zgarmaydigan kattalik. Natijada quyidagi formulani olamiz:

$$dw = \text{const}\, \delta(E - E_0) e^S \prod_a dE_a. \tag{1.26}$$

dw ning ma'nosini eslaylik - qismsistemalarining enegiyalari $(E_a, E_a + dE_a)$ intervalda bo'lgan holda sistemani uning to'liq energiyasi ($E = \sum_a E_a = E_0,\ E_0{+}dE$) bo'lgan holatda topish extimolligi. Ko'rinib turibdiki, ***extimolligi eng yuqori bo'lgan holat - entropiyasi maksimal bo'lgan holatdir.***

(1.26)-formuladan quyidagi hulosaga kelish mumkin: makroskoik sistema entropiyasi maksimal bo'lgan holatga o'tishga harakat qiladi. Sistema E energiyaga ega bo'lib muvozanat holatida turgan bo'lsa uning entropiyasi mana shu E energiyaga mos keluvchi maksimal mumkin bo'gan qiymatga teng bo'ladi. Tajribadan ma'lumki, ixtiyoriy sistema muvozanat holatidan chiqarilsa juda qisqa vaqt (relaksatsiya vaqti) ichida u yana muvozanat holatiga o'tadi (bu holat eski muvozanat holati bo'lmasligi ham mumkin). (1.26)-formula bo'yicha muvozanat holatidan chiqarilgan (masalan, tashqi ta'sir natijasida) sistemaning rivojlanish yo'nalishi juda katta extimollik bilan uning entropiyasining o'sishiga mos keluvchi yo'nalishdir. Ya'ni, sistema muvozanat holatidan chiqarildimi, u yangi energiyaga mos keluvchi maksimal entropiyali holatga o'tishga harakat qiladi. Olingan natija ***entropiayning o'sish qonuni*** deyiladi. Shuni qayd qilish kerakki, entropiya kamayishi ham mumkin, ammo bunday hodisaning extimolligi shu darajada kichik bo'ladi-ki, uni hech qachon e'tiborga olmasak ham bo'ladi.

Entropiya tushunchasi va uning o'sish qonuni birinchi bo'lib ***Clausius***[3] tomonidan 1859–1865-yillarda o'rnatilgan.

1.8 Magnetiklar sistemasi

N ta atom berilgan bo'lsin. Har bir atomning magnit momenti bor, uning son qiymati μ, z-o'qiga proeksiyasi $\pm\mu$ qiymatlarni qabul qilishi mumkin.

[3] Rudolf Julius Emanuel Clausius (1822-1888) - buyuk nemis fizigi. Rus tilida - Клаузиус.

Sistema z-o'qi bo'yicha yo'nalgan tashqi magnit maydoni $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ da bo'lsin Mag.momenti yuqoriga qaragan atomlarning sonini $n_{\uparrow}$, momenti quyiga qaraganlarining sonini $n_{\downarrow}$ deb belgilaymiz. Bu holda $N = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ bo'ladi. Yangi o'zgaruvchi kiritaylik: $n_{\uparrow} - n_{\downarrow} = 2m$. Ko'rinib turibdiki, $n_{\uparrow} = \frac{1}{2}N + m$, $n_{\downarrow} = \frac{1}{2}N - m$. Bu formulalardan m ning manosi ko'rinib turibdi. Sistemaning energiyasi m ning funksiyasi - har bir atomning energiyasi $\varepsilon = -\mu \cdot \mathbf{B}$ bo'lgani uchun to'liq energiya $E = n_{\uparrow}(-\mu B) + n_{\downarrow}\mu B = -2m\mu B$ ga teng. Demak, sistemaning energiyasini aniqlash uchun m sonini aniqlasak bo'ldi ekan. Misol sifatida 3-ta magnetikdan boshlaylik:

$$(\uparrow + \downarrow)^3 = \uparrow\uparrow\uparrow + 3\uparrow\uparrow\downarrow + 3\uparrow\downarrow\downarrow + \downarrow\downarrow\downarrow$$

Birinchi konfiguratsiyaning energiyasi $E = -3\mu B$, unga bitta holat mos keladi; ikkinchi konfiguratsiyaning energiyasi $E = -\mu B$, unga uchta holat mos keladi; uchinchi konfiguratsiyaning energiyasi $E = \mu B$, unga ham uchta holat mos keladi; ohirgi konfiguratsiyaning energiyasi $E = 3\mu B$, unga bitta holat mos keladi. Ikkinchi va uchinchi holatlar uch karrali aynigan ekan, ularning statistik vazni 3 ga teng: $\Delta\Omega(\mu B) = \Delta\Omega(-\mu B) = 3$. Undan tashqari, $\Delta\Omega(3\mu B) = \Delta\Omega(-3\mu B) = 1$.

Huddi shu muloxazalarni N-ta atomlar (magnetiklar) sistemasiga qo'llaylik. Hamma magnetiklar yuqoriga qarab turgan bo'lsin, tartib - to'liq, statvazn - birga teng, entropiya - nolga teng. Bitta atomning momenti proeksiyasi -1/2 bo'lsin, qolgan $N-1$ ta atomlarning spinlari yuqoriga qarab turgan bo'ladi, umumiy energiya $E_{N-1} = -(N-2)\mu B$, bunday energiyali holatni N ta yo'l bilan olish mumkin, demak, statvazn $\Delta\Omega(E_{N-1}) = N$. Agar ikkita atomning spin proeksiyalari pastga qaragan bo'lsa $E_{N-2} = -(N-4)\mu B$ bo'ladi, statvazn $\Delta\Omega(E_{N-4}) = C_N^2 = \frac{1}{2}N(N-1)$ (N ta jismdan 2 tasini ajratib olish variantlarining soni), entropiya oshdi: $S_{N-2} = \ln\Delta\Omega(E_{N-4}) > \ln\Delta\Omega(E_{N-2}) = S_{N-1}$. Davom ettirsak, maksimal statvazn spinlarning yarmisi yuqoriga, yarmisi pastga qaragan holga to'g'ri keladi. Bu holda tartibsizlik maksimal darajaga va entropiya maksimal qiymatga erishadi.

Tartib va entropiya orasidagi bog'lanishni topdik - sistemadagi tartibsizlik qancha katta bo'lsa uning entropiyasi ham oshadi. Bu asosda odatda entropiya tartibsizlik o'lchami ekan deyiladi.

Umumiy formulaga o‘taylik:

$$(\uparrow + \downarrow)^N = \sum_{m=-\frac{1}{2}N}^{m=\frac{1}{2}N} \frac{N!}{\left(\frac{1}{2}N+m\right)!\left(\frac{1}{2}N-m\right)!} \uparrow^{\frac{1}{2}N+m} \downarrow^{\frac{1}{2}N-m}.$$

Bu qatordagi koeffisientning ma’nosi quyidagicha - spinlarning $\frac{1}{2}N + m$ tasi yuqoriga qaragan va $\frac{1}{2}N - m$ tasi esa pastga qaragan vaziyatni

$$\frac{N!}{\left(\frac{1}{2}N+m\right)!\left(\frac{1}{2}N-m\right)!}$$

xil yo‘l bilan hosil qilish mumkin[4] (biri-biridan farq qilib bo‘lmaydigan atomlar haqida gap ketayotibdi). Spinlarning $\frac{1}{2}N+m$ tasi yuqoriga qaragan va $\frac{1}{2}N-m$ tasi esa pastga qaragan holatning energiyasi

$$E(N,m) = -\left(\frac{1}{2}N+m\right)\mu B + \left(\frac{1}{2}N-m\right)\mu B = -2m\mu B$$

ga teng. Statistik vaznning ta’rifi bo‘yicha $E(N,m)$ energiyali makroskopik holatning statistik vazni mana shu energiyalik makroholatni necha xil yo‘l bilan tashkil qilish mumkinligiga, ya’ni, bu bitta makroholatga nechta mikroholatlar mos kelishiga teng. Shuning uchun $E(N,m)$ energiyali holatlarning statistik vazni quyidagi bo‘lib chiqdi:

$$\Delta\Omega(N,m) = \frac{N!}{\left(\frac{1}{2}N+m\right)!\left(\frac{1}{2}N-m\right)!}.$$

Holatlarning umumiy soni 2^N ga teng. Statistik sistemada N juda katta son, shuni hisobga olish kerak. $\Delta\Omega$ ning o‘rniga $\ln\Delta\Omega$ ni hisoblash qulayroqdir. Stirling formulasi

$$\ln N! \simeq N \ln\frac{N}{e} + \frac{1}{2}\ln(2\pi N) \tag{1.27}$$

dan foydalanamiz[5]. Bu holda quyidagini topish mumkin:

$$\ln\Delta\Omega(N,m) = \ln N! - \ln\left(\frac{1}{2}N+m\right)! - \ln\left(\frac{1}{2}N-m\right)! \simeq$$

[4] Umumiy formula quyidagicha: N -ta bir-biridan farq qilmaydigan jismlarning N_1-tasi bir holatda, qolgan N_2-tasi boshqa holatda bo‘lsa bunday holatni tashkl qilish variantlari $N!/(N_1!N_2!)$ ga teng.

[5] Ohirgi hadni faqatgina hozir ko‘rilayotgan misoldagina ishlatamiz, boshqa hech qachon ishlatmaymiz. Sababi - uning hissasi juda kichikdir, ammo ko‘rilayotgan misolda uning hisobga olinishi taqsimot funksiyasining normasini to‘g‘ri topishga kerak bo‘ladi.

$$\simeq N \ln \frac{N}{e} - \left(\frac{1}{2}N + m\right) \ln \frac{N/2+m}{e} - \left(\frac{1}{2}N - m\right) \ln \frac{N/2-m}{e} +$$
$$+\frac{1}{2}\ln(2\pi N) - \frac{1}{2}\ln(\pi(N+2m)) - \frac{1}{2}\ln(\pi(N-2m)).$$

Yangi o'zgaruvchi $x = 2m/N$ kiritish maqsadga muvofiqdir. N juda katta son bo'lgani uchun x juda kichik bo'lib chiqadi. Yuqoridagi formulani x bo'yicha qatorga yoyib va bu qatorda x^2 aniqlikdagi hadlarnigina qoldirib quyidagini keltirib chiqarish mumin:

$$\ln \Delta\Omega(N,m) = N \ln 2 - \frac{N}{2}x^2 + \frac{1}{2}\ln \frac{2}{\pi N}. \tag{1.28}$$

Demak,

$$\Delta\Omega(N,m) = 2^N \sqrt{\frac{2}{\pi N}}\, e^{-2m^2/N}. \tag{1.29}$$

$\Delta\Omega(N,m)$ uchun Gauss taqsimoti kelib chiqdi. Ko'rinib turibdiki,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dm\, \Delta\Omega(N,m) = 2^N,$$

bu esa, yuqorida aytilganidek, holatlarning to'liq soni. (1.27)-formulada ikkinchi had mana shu norma shartini bajarish uchun qoldirilgan edi, bundan keyin

$$\ln N! \simeq N \ln \frac{N}{e} \tag{1.30}$$

formuladan foydalanveramiz[6].

(1.29)-formulaning grafigi ilovadagi I.2-rasmda ko'rsatilgan. Taqsimot cho'qqisiga $\Delta\Omega(N,0) = 2^N\sqrt{2/(\pi N)}$ son mos keladi. Taqsimot o'ta tor va o'tkir uchli ekan. $m^2 = N/2$ da $\Delta\Omega(N,0)/\Delta\Omega(N,\sqrt{N/2}) = e$ bo'ladi, shuning uchun $m_0 = \sqrt{N/2}$ son taqsimotning yarim kengligi deyiladi.

(1.21)- va (1.28)-formulalarni solishtirsak ko'rilayotgan sistemaning entropiyasi uchun quyidagini topamiz:

$$S = \ln \Delta\Omega(N,m) = \ln\left(\frac{2^{N+1/2}}{\sqrt{\pi N}}\right) - \frac{N}{2}x^2 \simeq \ln\left(\frac{2^N}{\sqrt{\pi N}}\right) - \frac{N}{2}x^2. \tag{1.31}$$

[6]Bu formulani keltirib chiqarishning oson yo'li quyidagicha:

$$\ln N! = \sum_{n=1}^{N} \ln n \simeq \int_1^N dn \ln n \simeq N \ln(N/e).$$

Ko‘rinib turibdiki, $x = 0$ ($m = 0$) nuqta entropiyaning maksimal qiymatiga to‘g‘ri keladi.

Entropiyaning ta’rifi bo‘yicha statistik vazn oshgan sari sistemaning entropiyasi ham osha boshlaydi. Demak, $m = 0$ hol maksimal entropiyali hol bo‘lib uning amalga oshish extimolligi eng katta bo‘ladi. Ammo $m = 0$ - sistemada tartibsizlik eng maksimal bo‘lgan holdir, bundan kelib chiqadigan hulosa: ***entropiya - tartibsizlik o‘lchovidir.*** Entropiyaning o‘sish yo‘nalishi - tartibsizlikning o‘sishi yo‘nalishidir. O‘ziga qo‘yib qo‘yilgan sistema entropiyasi maksimal bo‘lgan holatga o‘tmoqchi bo‘ladi, demak, u tartib eng kam bo‘lgan holatga o‘tishga intilgan ekan. $m = \pm N/2$ hollarga $\Delta\Omega(N, \pm N/2) = 1$ mos keladi, spinlarning hammasi bir tomonga yo‘nalgan, sistemada maksimal tartib o‘rnatilgan. Bu holatlarning entropiyasi nolga teng. Shunga yarasha ularning amalda uchrash extimolligi ham eng kichik bo‘ladi - (1.26)-ga qarang. Demak, magnetiklar sistemasi muvozanat holatida ekan $m = 0$ bo‘lishi kerak. Spinlarning qandaydir bir qismining muvozanatdan chetga chiqish extimolligi nimaga teng?

Bu savolga javobni real magnetiklar misolida ko‘raylik. Ular uchun $N \simeq 10^{22}$. Bu - qattiq jismda 1 sm^3 dagi atomlar soni. Muvozanat holatiga $m = 0$ to‘g‘ri keladi.

1. $m = 10^{10}$ bo‘lsin (shuncha atom muvozanat holatidan chetga chiqqan bo‘lsin). Bu holda

$$\frac{\Delta\Omega(N, m)}{\Delta\Omega(N, 0)} = e^{-2m^2/N} = e^{-2\cdot 10^{-2}} \simeq 0.98.$$

Demak, atomlarning $m/N = 10^{-12}$ qismini muvozanatdan chetga chiqqan holda topish extimolligi deyarli birga teng ekan. Haqiqatda xech qachon xech qanday sistema o‘zining aniq muvozanat holida turmaydi, ixtiyoriy (makroskopik) sistemada muvozanat holidan (entropiya maksimal bo‘lgan holatdan) chetga chiqish ro‘y berib turadi. Keltirilgan misoldan ko‘rinib turibdiki, sistemaga kirgan zarrachalarning 10^{-12} qismi muvozanatdan chetlashishi extimolligi yuqori ekan. Ammo 10^{-12} son - o‘ta kichik sondir.

2. $m = 10^{12}$ bo‘lsin. Bu holda $m/N = 10^{-10}$ va

$$\frac{\Delta\Omega(N, m)}{\Delta\Omega(N, 0)} = e^{-2m^2/N} = e^{-200} \simeq 1.38 \cdot 10^{-87}.$$

Muvozanat (maksimal entropiyalik) holatidan chetga chiqqan zarrachalar soni