ГЛАВА 1

Принципы статистической механики

Термодинамика является феноменологической теорией, основанной на нескольких фундаментальных законах, полученных из эмпирических наблюдений. В противоположность этому статистическая механика дает дедуктивный способ описания макромира, исходя из микроскопической картины физического мира. При этом статистическая механика опирается на представление об атомном или молекулярном строении вещества и основные динамические законы атомного мира в сочетании с основными положениями теории вероятности. Она отвечает на вопросы, какие физические законы микромира лежат в основе термодинамических законов, как можно «объяснить» термодинамику на основе этих законов и почему данная физическая система обладает определенными термодинамическими характеристиками. В действительности основные принципы статистической механики таят в себе очень глубокие и сложные вопросы, на которые нелегко ответить; однако тому, кто только начинает изучать статистическую физику, не стоит уделять слишком много внимания этим вопросам. Более важно изучить методы статистической механики и понять, как они применяются при решении физических задач.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

§ 1. Микроскопические состояния

Микроскопические и макроскопические состояния. Наблюдаемая физическая система обычно состоит из очень большого числа атомов и молекул и поэтому обладает чрезвычайно большим числом динамических степеней свободы. Но обычно измеряются только несколько физических величин, например температура, давление и плотность, которые определяют «состояние» системы. Состояние, определенное таким приближенным образом, называется *макроскопическим состоянием* (например, термодинамическое состояние). Вместе с тем с точки зрения динамики всякое состояние системы можно определить, по крайней мере в принципе, с любой желаемой точностью, задавая значения всех динамических

переменных системы. Определенное таким образом состояние называется *микроскопическим состоянием.*

Классическая статистическая механика и квантовая статистическая механика. Статистическая механика, основанная на классической механике, называется *классической статистической механикой*, а основанная на квантовой механике — *квантовой статистической механикой.* Поскольку точными законами атомного мира являются законы квантовой механики, то более последовательной и точной должна быть квантовая статистическая механика. Поэтому можно сказать, что классическая статистическая механика полезна лишь как некоторое приближение к квантовой статистической механике. Но классическая теория даже в настоящее время имеет большую ценность как с теоретической, так и с педагогической точки зрения, поскольку она позволяет лучше понять основные идеи статистической механики.

Классическое фазовое пространство. Пусть $(q_1, q_2, \ldots, q_f)$ — обобщенные координаты системы с f степенями свободы и $(p_1, p_2, \ldots, p_f)$ — сопряженные им импульсы. Микроскопическое состояние системы определяется заданием значения переменных $(q_1, q_2, \ldots, q_f, p_1, p_2, \ldots, p_f)$. Рассматривая эти $2f$ переменных как координаты, мы получаем $2f$-мерное пространство, называемое *фазовым пространством* системы. Каждая точка в фазовом пространстве (фазовая точка) соответствует микроскопическому состоянию. Следовательно, микроскопические состояния в классической статистической механике образуют непрерывную совокупность точек в фазовом пространстве.

Если гамильтониан системы обозначить $\mathscr{H}(q, p)$, то движение системы будет определяться каноническими уравнениями движения

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_j}, \qquad \dot{q}_j = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_j} \qquad (j = 1, 2, \ldots, f). \tag{1.1}$$

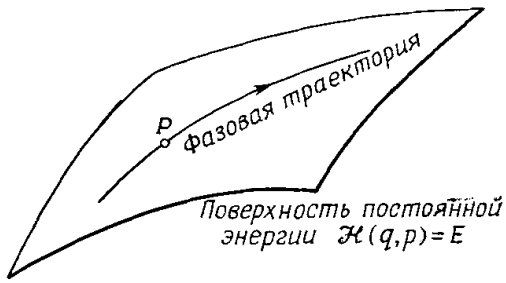
Они задают движение фазовой точки P_t, которая определяет состояние системы в момент времени t. Это движение точки P_t мы будем называть *естественным движением* в фазовом пространстве. Траектория фазовой точки, описываемая при естественном движении, называется *фазовой траекторией.* Для консервативных систем энергия является постоянной, т. е.

$$\mathscr{H}(q, p) = E. \tag{1.2}$$

Следовательно, фазовая траектория должна лежать на поверхности постоянной энергии (эргодической поверхности), как показано на фиг. 1.

Квантовые состояния. Согласно квантовой механике, координаты p и q не могут быть определены одновременно (принцип

неопределенности Гейзенберга), так что классическое понятие фазового пространства теряет свой точный смысл. В квантовой статистической механике микроскопическое состояние системы определяется как состояние в квантовомеханическом смысле.



Фиг. 1

В частности, стационарное динамическое состояние системы должно быть одним из квантовых состояний, определяемых уравнением

$$\mathcal{H}\varphi_l = E_l\varphi_l \qquad (l=1,\ 2,\ \ldots). \tag{1.3}$$

Здесь $\mathcal{H}$ — гамильтониан системы, E_l — энергия квантового состояния l и φ_l — волновая функция, представляющая квантовое состояние l.

Следовательно, совокупность микроскопических состояний в квантовой статистической механике образует дискретную счетную совокупность квантовых состояний, определяемых квантовым числом l. (В статистической механике обычно рассматривают системы, ограниченные в пространстве, так что квантовое число l дискретно. Системы с неограниченными размерами рассматриваются как предельный случай конечных систем.)

§ 2. Статистическое описание

Когда система находится в равновесии и ее макроскопические параметры остаются постоянными, с микроскопической точки зрения ее состояние не фиксировано, и поэтому нельзя точно сказать, в каком микроскопическом состоянии находится система. Возможно определить лишь вероятность для совокупности всех возможных микроскопических состояний системы.

Основное предположение о наблюдаемых значениях физических величин. Предположим, что в рассматриваемой системе наблюдается физическая величина A. С микроскопической точки зрения A есть динамическая величина и является функцией микроскопических переменных. В классической механике микроскопическое значение A определяется функцией $A(q, p) = A(\mathrm{P})$ (P — фазовая точка), а в квантовой механике среднее значение