Η κανονική κατανομή στη

κλασσική περιγραφή

Κλασσική στατιστική φυσική

- Μια πολύ απλή περίπτωση για να ξεκινήσουμε είναι:
- Να θεωρήσουμε ένα Σημειακό σωματίδιο σε 1-Διάσταση
  - *Τα σωματίδιο υπακούει στη Χαμιλτωνιανή που περιγράφει την εξίσωση κίνησης.*

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}(q, p) = E$$

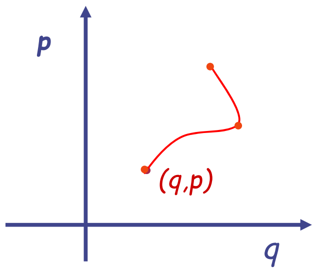
- Τα **q** και **p** περιγράφουν πλήρως το σωματίδιο:
  - ***q, p*** *συντεταγμένες θέσης και ορμής.*

$\Rightarrow$ Η γνώση των q, p για t = 0 μας επιτρέπει να γνωρίζουμε τις τιμές τους για κάθε t.

Αυτό μπορεί να περιγραφεί σχηματικά ως εξής:

- Θεωρούμε τον 2-D χώρο που ορίζεται από τα q, p:

$\equiv$ "**Κλασσικός Φασικός Χώρος**" του σωματιδίου



Για κάθε **t**, τα **(q, p)** του σωματιδίου περιγράφουν την "**κατάστασή**" του.

Ο καθορισμός της "Κατάστασης του σωματιδίου" $\equiv$

Σε ποιο σημείο του επιπέδου βρίσκεται το σωματίδιο

- Τα q, p είναι συνεχείς μεταβλητές: $\Rightarrow$

Υπάρχει ένας ∞ αριθμός σημείων στον Κλασσικό Φασικό Χώρο

- Θέλουμε να περιγράψουμε την "**κατάστασή**" του **σωματιδίου κλασσικά με ένα τρόπο ώστε ο αριθμός των καταστάσεων είναι απαριθμήσιμος**

«ΤΕΧΝΑΣΜΑ»

$\Rightarrow$ **Χωρίζω τον χώρο q, p σε μικρά διαστήματα.**

Δq (για το **q**) & Δ**p** (για το **p**).

Κλασσική περιγραφή της κατάστασης ενός συστήματος

Ο φασικός χώρος τότε διαιρείται σε μικρές κυψελίδες ίσου εμβαδού:

ΔqΔp ≡ **h**≡ *(αυθαίρετη (κλασσικά) σταθερά)*

Η **'Κατάσταση'** του σωματιδίου (κλασσικά)

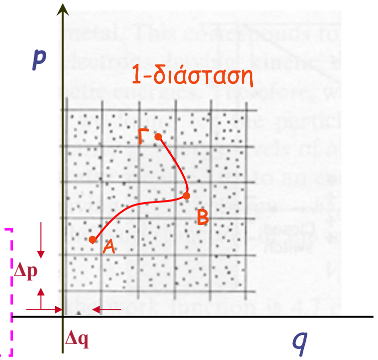
καθορίζεται ≡

προσδιορίζοντας σε ποια κυψελίδα του ΧΦ βρίσκεται το σωματίδιο

που γίνεται ακριβέστερη όσο πιο μικρή είναι αυτή η κυψελίδα

h <<

Κβαντομηχανικά
Αρχή αβεβαιότητας:
Δεν μπορούμε ταυτόχρονα να ξέρουμε το *q* και το *p*,
ΔqΔp ≥ ħ/2



$dq >> \Delta q$
$dp >> \Delta p$

Θεωρώ ένα στοιχειώδες τμήμα του φασικού χώρου, διαστάσεων dq, dp

Μέσα σ' αυτό το ορθογώνιο dqdp χωρούν dΓ κυψελίδες:

$$d\Gamma = \frac{dpdq}{h}$$

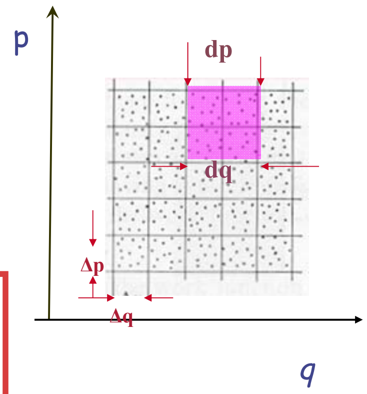
Δηλ. μέσα

σε μια στοιχειώδη περιοχή του φασικού χώρου όπου η συντεταγμένη

q έχει τιμή μεταξύ q και q+dq, και η

p έχει τιμή μεταξύ p και p+dp

υπάρχουν dΓ καταστάσεις (κυψελίδες)



ΤΙ ΚΑΤΑΦΕΡΑΜΕ?

παρότι είμαστε στον χώρο των φάσεων

(κλασσική στατιστική)

Να απαριθμήσουμε τις καταστάσεις

$$d\Gamma = \frac{1}{h}dpdq$$

Γενικεύουμε την προηγούμενη ανάλυση στην περίπτωση ενός κλασσικού συστήματος με ν ΒΕ, έχουμε:

\# καταστάσεων του συστήματος με συντεταγμένες θέσης και ορμής στα διαστήματα q_1, q_1+dq_1.. , q_ν, $q_\nu+dq_\nu$,p_1, p_1+dp_1.., p_ν, $p_\nu+dp_\nu$ =

Πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των φάσεων:

$$\frac{1}{h^\nu} dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$$

$$h^\nu = (\Delta q_1 \Delta p_1)(\Delta q_2 \Delta p_2)...(\Delta q_\nu \Delta p_\nu)$$

ο όγκος των κυψελίδων που χωρίζεται ο φασικός χώρος

Κλασσική και κβαντική περιγραφή της κατάστασης ενός συστήματος

Η στατιστική περιγραφή ενός συστήματος με έννοιες της κλασσικής Μηχανικής είναι ανάλογη με την κβαντική περιγραφή.

Η μόνη διαφορά βρίσκεται στην ερμηνεία:

Κβαντική Θεωρία

η **μιΚατάσταση** ενός συστήματος αντιστοιχεί σε μια συγκεκριμένη **κβαντική κατάσταση**

Κλασσική Θεωρία

η **μιΚατάσταση** ενός συστήματος αντιστοιχεί σε μια **συγκεκριμένη κυψελίδα** στον Χ.Φ

Ένα μονωμένο σύστημα σε ΘΙ έχει ίση πιθανότητα να βρίσκεται σε μια από τις οποιαδήποτε από τις προσιτές καταστάσεις του

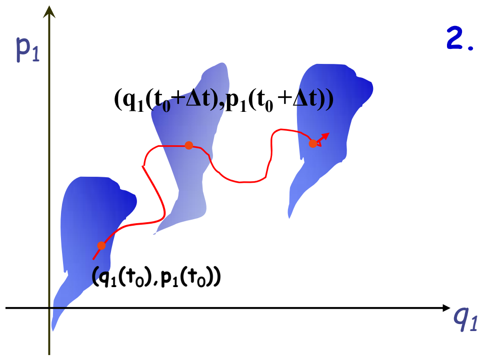
δηλαδή σε μια από τις προσιτές σε αυτό κυψελίδες του Χ.Φ

ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ - Θεώρημα του Liouvile

$$\frac{1}{h^{\nu}} dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$$

1. **Το αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο από την συγκεκριμένη επιλογή γενικευμένων συντεταγμένων**

   Μια ορισμένη περιοχή του Χ.Φ. πρέπει να περιέχει πάντα τον ίδιο αριθμό καταστάσεων, ανεξάρτητα από τις τις συντεταγμένες που χρησιμοποιούμε για την περιγραφή.



2. **Οι περιοχές του χώρου των φάσεων που αντιστοιχούν σε διαφορετικές χρονικές στιγμές έχουν τον ίδιο όγκο**

   περιέχουν τον ίδιο αριθμό καταστάσεων

Κβαντικά

$$Z = \sum_{E_r} g(E_r)\exp(-\beta E_r)$$

Άθροισμα παραγόντων Boltzmann πάνω σ΄ολες τις ενεργειακές στάθμες, που η καθεμιά έχει μετρηθεί όσες φορές πρέπει.

Κλασσικά

Άθροισμα → **ολοκλήρωμα** πάνω σε καταστάσεις στον χώρο των φάσεων

(διαιρέσαμε τον Χ.Φ σε κυψελίδες όγκου h^{ν} .....)

$$\mathrm{E} = H(q,p) \equiv H(q_1,....q_\nu, p_1,....p_\nu)$$

$$Z = \frac{1}{h^{\nu}}\int \mathrm{e}^{-\beta H(p,q)} dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$$

Αν το σύστημα αποτελείται από όμοια μη – εντοπισμένα υποσυστήματα:

$$Z = \frac{1}{h^{\nu} N!}\int \mathrm{e}^{-\beta H(p,q)} dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$$

Συνάρτηση επιμερισμού στην κλασσική στατιστική

Προσεγγίσεις

1. Οι **εκφυλισμοί** $g(E_r)$ στην κβαντική συνάρτηση επιμερισμού, αντικαταστάθηκαν από την **πυκνότητα καταστάσεων** στον ΧΦ

   προσέγγιση ικανοποιητική πάντα

2. Οι **διάκριτοι** και **ασυνεχώς μεταβαλλόμενοι** παράγοντες Boltzmann $e^{-\beta E_r}$ αντικαταστάθηκαν από την **συνεχή** και **ομαλά μεταβαλλόμενη** συνάρτηση $e^{-\beta H(p,q)}$

   Αυτό μπορεί να γίνει ΜΟΝΟ όταν:

Οι διαδοχικοί παράγοντες Boltzmann στην κβαντική συνάρτηση επιμερισμού ΔΕΝ διαφέρουν πολύ μεταξύ τους

$$\left|E_{r+1} - E_r\right| << kT$$

ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΣ ΙΣΧΥΟΣ ΤΗΣ ΚΛΑΣΣΙΚΗΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ

Για T<< αποκλίσεις από την κλασσική συμπεριφορά

Κβαντική Θεώρηση	Κλασσική Θεώρηση
εκφυλισμοί $g(E_r)$	Πυκνότητα καταστάσεων (Χ.Φ) $\frac{1}{h^{\nu}} dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$
Παράγοντες Boltzmann $e^{-\beta E_r}$ διάκριτοι –ασυνεχώς μεταβαλλόμενοι	$e^{-\beta H(p,q)}$ Συνεχή – ομαλά μεταβαλλόμενη συνάρτηση
Συνάρτηση επιμερισμού $Z = \sum_{E_r} g(E_r)\exp(-\beta E_r)$	Συνάρτηση επιμερισμού $Z = \frac{1}{h^{\nu}}\int \exp\left[-\beta H(p,q)\right] dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$

Πιθανότητα κατάστασης

$$Z=\sum_s \exp(-\beta\varepsilon_s)$$

$$p_s=\frac{1}{Z}e^{-\beta\varepsilon_s}$$

$$Z=\frac{1}{h^\nu}\int \exp[-\beta H(p,q)]dq_1....dq_\nu dp_1....dp_\nu$$

Η πιθανότητα ένα σύστημα (σε θερμική ισορροπία με Τ) να βρεθεί σε κατάσταση με συντεταγμένες θέσης και ορμής στα διαστήματα

q_i, q_i+dq_i, p_i, p_i+dp_i, $i=1,2,3......\nu$,

$$P(q_1,...,p_\nu)dq_1....dp_\nu=\frac{e^{-\beta H(p,q)}dq_1.....dp_\nu}{\int e^{-\beta H(p,q)}dq_1.....dp_\nu}$$

Θεώρημα ισοκατανομής Maxwell (1860)

Έστω σύστημα σε θερμική ισορροπία στην θερμοκρασία Τ

Θεώρημα ισοκατανομής

Μια γενικευμένη συντεταγμένη θέσης ή ορμής που εμφανίζεται στην Hamiltonian σαν **δευτεροβάθμιος μόνο** όρος συνεισφέρει στη μέση ενέργεια του συστήματος ενέργεια **kT/2**

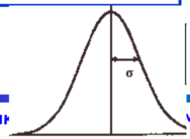
Έστω ξ μια από τις συντεταγμένες θέσεις ή ορμής : $H=A\xi^2+H'$

Η κατανομή πιθανότητας της ξ :

Τα Α και Η' δεν εξαρτώνται από το ξ

$$P(\xi)d\xi=\frac{\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi}{\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi}$$

Κατανομή Gauss



$$H=A\xi^2+H'$$

Η μέση ενέργεια που συνδέεται με την μεταβλητή ξ

$$\overline{A\xi^2}=\int\left(A\xi^2\right)P(\xi)d\xi=\int\frac{A\xi^2\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi}{\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi}$$

$$=-\frac{\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi\right)}{\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi}=-\frac{\frac{\partial X}{\partial\beta}}{X}=-\frac{\partial\ln X}{\partial\beta}$$

$$\boxed{\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi=X}$$

$$=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left[\int\exp\left(-\beta A\xi^2\right)d\xi\right]$$

$\boxed{\text{νέα μεταβλητή}\quad t=\xi\sqrt{\beta}}$

$$\boxed{\overline{A\xi^2}}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left[\beta^{-1/2}\int\exp\left(-At^2\right)dt\right]=\frac{1}{2\beta}=\boxed{\frac{1}{2}kT}$$

Μ.Ο του Αξ² πάνω στην πλήρη κατανομή πιθανότητας

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-At^2\right)dt=\sqrt{\frac{\pi}{A}}$$

Θεώρημα ισοκατανομής -Θερμοχωρητικότητα

Άμεση συνέπεια του Θεωρήματος της ισοκατανομής :

Μια γενικευμένη συντεταγμένη θέσης ή ορμής που εμφανίζεται στην Hamiltonian σαν δευτεροβάθμιος μόνο όρος συνεισφέρει στη θερμοχωρητικότητα του ποσό k/2

ΙΣΧΥΕΙ ΜΟΝΟ σε υψηλές θερμοκρασίες, γιατί τότε μόνο Ισχύει η συνθήκη:

$$\left|E_{r+1}-E_r\right|\ll kT$$

Τ<< : η διάκριτη φύση των σταθμών της ενέργειας ΔΕΝ μπορεί να αγνοηθεί.

$$\longrightarrow\quad C_v=f(T)$$