01

О дополнительной связи между каноническим и микроканоническим ансамблями в классической статистической механике

© А.Ю. Захаров

Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, Великий Новгород
E-mail: ayz@novsu.ac.ru

Поступило в Редакцию 3 февраля 2003 г.

Установлена взаимно-однозначная связь между доступным объемом фазового пространства микроканонического ансамбля и канонической статистической суммой.

Современное состояние статистической механики даже в ее классической ветви трудно признать удовлетворительным [1–3]. Дело не в том, что всякая модель с более или менее реалистическим взаимодействием между частицами не допускает точного решения или качественного анализа. Не менее существенно, что в самом переходе от классической механики к классической статистической механике имеются большие логические пробелы, начиная от эргодической гипотезы (иногда считающейся не очень существенной) и кончая взаимосвязями между ансамблями.

К примеру, переход от микроканонического ансамбля к каноническому существенно опирается на ряд неконтролируемых гипотез, которые справедливы для идеальных газов, но об „устойчивости" этих гипотез по отношению к взаимодействиям ничего не известно. В частности, процедура замены сколь угодно тонкого шарового слоя $E - \epsilon \leqslant \sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k^2/2m \leqslant E$ в пространстве импульсов на объем шара $0 \leqslant \sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k^2/2m \leqslant E$ при вычислении фазового объема Γ идеального газа безусловно оправданна; однако аналогично утверждение о замене сколь угодно тонкого слоя

$$E - \epsilon \leqslant H(p, q) \leqslant E \tag{1}$$

$(H(p, q)$ — гамильтониан системы) на весь объем фазового пространства внутри поверхности постоянной энергии системы частиц вызывает вполне обоснованные сомнения.

С другой стороны, вывод всех последующих ансамблей статистической механики, которые в практическом отношении гораздо более „продвинуты", чем микроканонический ансамбль, в значительной мере основывается на микроканоническом ансамбле. Поэтому представляется весьма актуальным сделать микроканонический ансамбль в такой же мере работоспособным, как канонический или большой канонический ансамбли. Для этой цели следует найти способ вычисления фазового объема системы, заключенного между двумя близкими поверхностями постоянной энергии.

Рассмотрим классическую систему N взаимодействующих (между собой и с внешним полем) тождественных частиц. Пусть эта система занимает объем V и изолирована от внешнего мира. Тогда состояние системы определяется положением изображающей точки в фазовом пространстве Γ, а эволюция системы описывается каноническими уравнениями движения Гамильтона. Для изолированной системы изображающая точка в фазовом пространстве движется по поверхности σ постоянной энергии, задаваемой уравнением σ: $H(p, q) - E = 0$ (E — энергия системы).

Положим, что энеригя системы не фиксирована, а заключена в промежутке $[E - \epsilon, E]$, $\epsilon > 0$. Тогда доступный объем $\Delta\Gamma$ фазового пространства системы равен

$$\Delta\Gamma = \int \chi_{[E-\epsilon,E]}\big(H(p, q)\big)d\Gamma, \tag{2}$$

где через

$$\chi_\Omega(x) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega; \\ 0, & x \notin \Omega; \end{cases} \tag{3}$$

обозначена характеристическая функция (индикатор) множества Ω, придающая в интеграле (2) всем точкам фазового пространства, соответствующим энергиям системы из промежутка $[E-\epsilon, E]$, единичный вес, а точкам вне этого промежутка энергий — нулевой вес. Таким образом, интеграл (2) дает объем фазового пространства, заключенного между поверхностями σ_1: $H(p,q)=E-\epsilon$ и σ_2: $H(p,q)=E$ (заметим, что в общем случае множества σ_1 и σ_2 могут быть несвязными).

Для характеристической функции множества используем интегральное представление:

$$\chi_{[E-\epsilon,E]}(x)=\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\tau\epsilon}{2}\right)}{\tau}\exp\left[i\tau\left(x-E+\frac{\epsilon}{2}\right)\right]d\tau. \tag{4}$$

Подставляя (4) в (1), найдем

$$\Delta\Gamma(N,V,E,\epsilon)=\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\tau\epsilon}{2}\right)}{\tau}\exp\left[-i\tau\left(E-\frac{\epsilon}{2}\right)\right] \times\left(\int\exp\left[i\tau H(p,q)\right]dpdq\right)d\tau. \tag{5}$$

Отметим, что внутренний интеграл по фазовому пространству есть каноническая статистическая сумма Z системы для мнимой температуры $T=\beta^{-1}=i/\tau$:

$$Z(N,V,i\tau)=\int\exp\left[i\tau H(p,q)\right]dpdq, \tag{6}$$

поэтому

$$\Delta\Gamma(N,V,E,\epsilon)=\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\tau\epsilon}{2}\right)}{\tau} \times\exp\left[-i\tau\left(E-\frac{\epsilon}{2}\right)\right]Z(N,V,i\tau)d\tau. \tag{7}$$

Таким образом, доступный объем $\Delta\Gamma$ фазового пространства системы в случае микроканонического ансамбля получается с помощью интегрального преобразования канонической статистической суммы $Z(i\tau)$ этой же системы от комплексной температуры $i\tau$.

Существенно, что установленное интегральное преобразование между $\Delta\Gamma$ и $Z(i\tau)$ имеет место независимо от термодинамического перехода $V \to \infty$, $N/V = n = \mathrm{const}$, что особенно важно в связи со ставшими актуальными в последние годы исследованиями наноструктур, а также исследованиями по теории фазовых переходов, поскольку корректной термодинамики малых систем (в том числе зародышей новых фаз) пока не существует.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Федеральной программы „Университеты России“ (проект УР.01.01.024), Программы Российско-Голландского сотрудничества NWO (проект 047.011.2001.011) и Федеральной целевой программы „Интеграция“ (проект № Б0056)

Список литературы

[1] *Березин Ф.А.* Лекции по статистической физике. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. 192 с.
[2] *Ruelle D.* Thermodynamic Formalism. The Mathematical Structures of Classical Equilibrium Statistical Mechanics. London e.a.: Addison-Wesley Publ. Co., 1978. 183 p.
[3] *Georgii H.-O., Hänggström O., Maes C.* // Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 18. / Eds. C. Domb, J. Lebowitz, London e.a.: Academic Press, 2000. P. 1–142.