Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по статфизике
Мостовому Сергею Дмитриевичу
Мостовой: Просьба свои домашки сдавать в бумажном виде. Так их проверять проще, почеркать что-то… Я люблю почеркать!

Многие из вас знают химическую кинетику. Она изучает скорость химических реакций. А тут у нас будет физическая кинетика, она изучает немного другое – теплопроводность, диффузию.

Постараемся ответить на пачку вопросов:

13. Из уравнений Гамильтона для эволюции микроскопического состояния классической системы многих частиц вывести уравнение Лиувилля для плотности вероятности в фазовом пространстве.

14. Кинетические функции распределения. Одночастичная функция распределения и связанные с ней физические характеристики классической неравновесной системы. Ограниченность описания кинетики системы с помощью только этой функции.

15. Из уравнения Лиувилля получить общую форму кинетического уравнения для одночастичной кинетической функции распределения. Что такое интеграл столкновений и каким общим требованиям он должен удовлетворять?

16. Записать кинетическое уравнение с релаксационным членом вместо интеграла столкновений и получить его стационарное решение в первом порядке по параметру τ.

Итак, начнём.

13. Из уравнений Гамильтона для эволюции микроскопического состояния классической системы многих частиц вывести уравнение Лиувилля для плотности вероятности в фазовом пространстве.

У нас есть N частиц и 6N-мерное пространство

$$r_{1x}, r_{1y}, \dots, r_{Nz}, p_{1x}, \dots, p_{Nz} <=> \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$$

И 6N-мерная плотность вероятности:

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$$

В 13-м вопросе требуется получить эволюцию плотности вероятности. Для этого нужно вспомнить факт из гамильтоновой механики:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \{H, A\}$$

Эволюция любой величины выражается через скобку Пуассона с гамильтонианом и получаем:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \{H, w\} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} \right)$$

Это и есть искомое уравнение Лиувилля.

14. Кинетические функции распределения. Одночастичная функция распределения и связанные с ней физические характеристики классической неравновесной системы. Ограниченность описания кинетики системы с помощью только этой функции.

Мы можем свернуть плотность вероятности по всем частицам, кроме первой:

$$F(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t) = \int d^3\vec{r}_2 \int d^3\vec{r}_3 \dots \int d^3\vec{p}_n * w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$$

Как можно догадаться, это одночастичная функция распределения.

Вопрос: она соответствует свободной частице? Ведь она зависит только от координат одной частицы!

Ответ: нет. Остальные частицы «зашиты» в $w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ и всё равно дают свой вклад.

15. Из уравнения Лиувилля получить общую форму кинетического уравнения для одночастичной кинетической функции распределения. Что такое интеграл столкновений и каким общим требованиям он должен удовлетворять?

Вернёмся к

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \{H, w\} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial w}{\partial p_i} \right)$$

Для дальнейшего продвижения нам нужно конкретизировать гамильтониан. Мы его можем записать как $H_0 + H_1$, где гамильтониан $H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right)$соответствует идеальному газу, а всё взаимодействие - это $H_1 = \sum_{i<j} \Phi |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$.

$\{H, w\}$ в общем случае аналитически не решается. А вот $\{H_0, w\}$ решается и получается

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = 0$$

Мы получали ДУ в ЧП, но есть проблема – его решения нефизичны. Т.к. мы выкинули взаимодействие частиц, мы выкинули столкновения, и в нашей системе никогда не установится равновесия. А это совсем нефизично – мы достигаем равновесия по затухающей экспоненте.

С этой целью статфизики ~~начали подгон~~ сообразили, что в правую часть надо добавить что-то. Это «что-то» они назвали интеграл столкновений:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = \text{интеграл столкновений}$$

Замечание. У статфизиков принято обозначение для интеграла столкновений $\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ (столкновений), $\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{coll}$ («collision» - столкновение). Обозначение чудовищное, поэтому что это никакая не производная. Обозначение родилось из «ну по размерности должно походить на $\frac{\partial F}{\partial t}$». Воспринимать его надо не как производную, а как цельный иероглиф.

Но как он должен выглядеть этот интеграл столковений?
Из самых грубых соображений предположим, что затухание происходит экспоненциально. Тогда (Квасников показывает), что отсюда выводится

$$\text{интеграл столкновений} = -\frac{F(t) - F_0}{\tau}$$

Как мы увидим дальше, это грубое приближение, но сойдёт пока. Этот вариант он назвал «релаксационным членом». Это нужно для этого вопроса:

16. Записать кинетическое уравнение с релаксационным членом вместо интеграла столкновений и получить его стационарное решение в первом порядке по параметру τ.

Полученное ДУ в ЧП можно решить аналитически – методом итераций. Нулевое приближение вообще не будет зависеть от времени – это стационарное распределение Максвелла:

$$F_0(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{n(\vec{r})}{\left(2\pi m\theta(\vec{r})\right)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\vec{p}^2}{2m\theta(\vec{r})}\right)$$

А вот первое уже будет:

$$F_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = F_0(\vec{r}, \vec{p}) - \tau\left(\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{p}}\right)$$

Осталось получить только $F_0(\vec{r}, \vec{p})$. А она получается из уравнения Максвелла:

$$F_0(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{n(\vec{r})}{\left(2\pi m\theta(\vec{r})\right)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\vec{p}^2}{2m\theta(\vec{r})}\right)$$

Обратите внимание на зависимость температуры $\theta(\vec{r})$ от точки в пространстве. Ну а чего вы хотели – у нас же неравновесные процессы. Это только в равновесии температура везде одинаковая.

На практике оказывается, что удобней для решения задач вместо импульсов использовать скорости:

$$F_1(\vec{r},\vec{v},t) = F_0(\vec{r},\vec{v}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}}\right)$$

$$F_0(\vec{r},\vec{v}) = n(\vec{r})\left(\frac{m}{2\pi m\theta(\vec{r})}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta(\vec{r})}\right)$$

Величину $\left(\frac{m}{2\pi m\theta\,(\vec{r})}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta(\vec{r})}\right)$ из распределения Максвелла часто обозначают как $w(v)$. Нам потребуется один готовый интеграл:

$$< v_x^2 > = \frac{\theta}{m}$$

$$< v^2 > = \frac{3\theta}{m}$$

Проверяется простым подсчётом интеграла (или, как больше люблю я, поиском первокура, который этот интеграл возьмёт).

Давайте посмотрим, как эта шняга применяется.

Задача 53.

Определить коэффициент теплопроводности газа (в частности, идеального, где $p = n\theta$) давление которого всюду постоянно, $p(z) = const$.

Я открою решение с ВВХ и дам комментарии.

Т.к. неоднорость только по z, всевозможные потоки у нас тоже только по z.

$$j_\varepsilon = \int v_z \frac{mv^2}{2} F d\vec{v}$$

И судя мы будем подставлять F_1, которую мы считаем:

$$F = F_0 - \tau v_z \frac{\partial F_0}{\partial z} = F_0 - \tau v_z w(\vec{v})\frac{\partial n}{\partial z} - \tau v_z n \frac{\partial}{\partial \theta} w(\vec{v})\frac{\partial \theta}{\partial z}$$

И вот этот ужас надо подставить в $j_\varepsilon = \int v_z \frac{mv^2}{2} F d\vec{v}$. Впрочем, слагаемое с F0 занулится, т.к. интеграл от нечётной функции по симметричным пределам равна 0. Так что получим вот такой ужас

$$\frac{\partial n}{\partial z}æ_n - \frac{\partial \theta}{\partial z} n \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{æ_n}{\theta}$$

где $æ_n$ - это вот такая вот страшная вещь $\int v_z * \frac{mv^2}{2} * w(v_z) d^3V$ - коэф теплопроводности. Интеграл $\int v_z * \frac{mv^2}{2} * w(v_z) d^3V$ придётся взять. Вот как это делает Мостовой:

$$\Rightarrow j_p = -\frac{\partial\theta}{\partial z}\left(-\frac{n}{\theta}\text{æ}_n + n\frac{\partial \text{æ}_n}{\partial\theta}\right) = -\frac{\partial\theta}{\partial z}\underbrace{n\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\text{æ}_n}{\theta}\right)}_{\tilde{\text{æ}}}.$$

д) вычислим:

$$\text{æ}_n = \left\langle \tau\frac{v^2}{3}\frac{mv^2}{2}\right\rangle = \frac{\tau}{3}\frac{m}{2}\int_0^\infty v^4\left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}}\cdot 4\pi v^2 dv =$$

$$= \frac{\tau}{3}\frac{m}{2}\cdot 4\pi\left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\frac{(2\cdot 3-1)!!}{2^3}\frac{\sqrt{\pi}}{\left(\frac{m}{2\theta}\right)^{3+\frac{1}{2}}} = \tau\frac{5}{2}\frac{\theta^2}{m}.$$

$$\tilde{\text{æ}} = n\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\tau}{\theta}\frac{5\theta^2}{2m}\right) = \frac{5}{2}\frac{n\theta\tau}{m}.$$

Не могу не вставить цитатку:

С.Д., указывая на парту в 5-18 у доски спиной к доске: А это парта для кого?
Студенты: Она сломанная!
Другой студент: Для тех, кто готов разбирать материал на слух!
С.Д.: Верно! Впрочем, с моим почерком только так и можно.

А что это за индекс n у каппы æ_n ? Потому что это не тот коэф теплопроводности! Он при постоянной концентрации n, а нам нужен при постоянном давлении. Поэтому ответ будет

$$\left(\frac{\partial n}{\partial\vec{r}}\right)_p = \left(\frac{\partial n}{\partial\theta}\right)_p\frac{\partial\theta}{\partial\vec{r}} = -\frac{p}{\theta^2}\frac{\partial\theta}{\partial\vec{r}}$$
$$= (\text{пользуемся соотношением для идеального газа } p = n\theta)$$
$$= -\frac{n}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial\vec{r}} = -\frac{\partial\theta}{\partial\vec{r}}\left(n\frac{\partial\text{æ}_n}{\partial\theta} - \frac{n}{\theta}\text{æ}_n\right) = -\frac{\partial\theta}{\partial\vec{r}}n\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\text{æ}_n}{\theta}\right)$$

Вот сюда подставляете æ_n и только тогда получаете ответ.

Задача скучное говно, так что я вот вам переписал решение Мостового, и «кушайте это с кашей».

Важный частный случай однородного распределения температуры: $\theta(\vec{r}) = \theta$

Тогда $F_0(\vec{r},\vec{v}) = n(\vec{r})w(\vec{v})$, $\quad w(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi m\theta}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{mv^2}{2\theta}\right)$

Тогда

$$F_1(\vec{r},\vec{v},t) = F_0(\vec{r},\vec{v}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}}\right)$$
$$= n(\vec{r})w(\vec{v}) - \tau\left(\vec{v}w(\vec{v})\frac{\partial n(\vec{r})}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}n(\vec{r})\frac{\partial w(\vec{v})}{\partial \vec{v}}\right)$$
$$= w(\vec{v})\left(n(\vec{r}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial n(\vec{r})}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{m\vec{v}}{\theta}\right)\right)$$

Эту готовую формулу применим в двух последующих задачах.

Задача 56.

Считая электронный газ в металле классическим газом, рассчитать, используя решение стационарного кинетического уравнения с релаксационным членом, проводимость σ электронного газа при условии $\theta = const$, теплопроводность $\varkappa$ электронного газа при условии отсутствия электрического тока, и в приближениях $\tau = const$ и $\lambda = v\tau = const$ определить константу $\frac{e^2\varkappa}{\sigma\theta} = const$ в законе Видемана-Франца.

Вновь нашей рабочей лошадкой будет формула

$$F_1(\vec{r},\vec{v},t) = F_0(\vec{r},\vec{v}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}}\right)$$

В этой задаче θ=const, поэтому

$$F_1(\vec{r},\vec{v},t) = w(\vec{v})\left(n(\vec{r}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial n(\vec{r})}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{m\vec{v}}{\theta}\right)\right)$$

Т.к. у нас одномерие, то

$$F_1(z,v,t) = w(v)\left(n(z) - \tau\left(v\frac{\partial n(z)}{\partial z} + \frac{\partial U}{\partial z}\frac{mv}{\theta}\right)\right)$$

По условию n(z)=const, поэтому

$$F_1(v,t) = w(v)\left(n - \tau\frac{\partial U}{\partial z}\frac{mv}{\theta}\right)$$

$-\frac{\partial U}{\partial z}$ - это сила. Она равна Ee.

$$F_1(v,t) = w(v)\left(n - \tau Ee\frac{mv}{\theta}\right)$$

Мостовой, получив эту формулу: …эн минус тау ее! ЕЕ!

Ну хорошо, нашли мы $F_1(\dots)$, а что нам делать с ней дальше? Выразить через неё плотность тока:

$$j_e = ej_n$$

Где j_e – плотность электрического тока, а j_n – плотность тока концентрации.

$$j_e = ej_n = e\int F_1(v_z)v_z dv_z$$

Подставляем F1(). Слагаемое с n уничтожится (интеграл от нечётной функции по симметричным пределам), и останется

$$j_e = \frac{e^2 E\tau}{\theta} \int v_z^2 dv_z$$

А это тот готовый интеграл, равный θ/m. Сравним с

$$j_e = E\sigma$$

и делаем вывод, что проводимость σ равна

$$\sigma = \frac{e^2\tau}{\theta}$$

И тут Мостовой говорит: «Мы получили формулу, но с экспериментом она расходится. Прям сильно. Ваши гипотезы?»

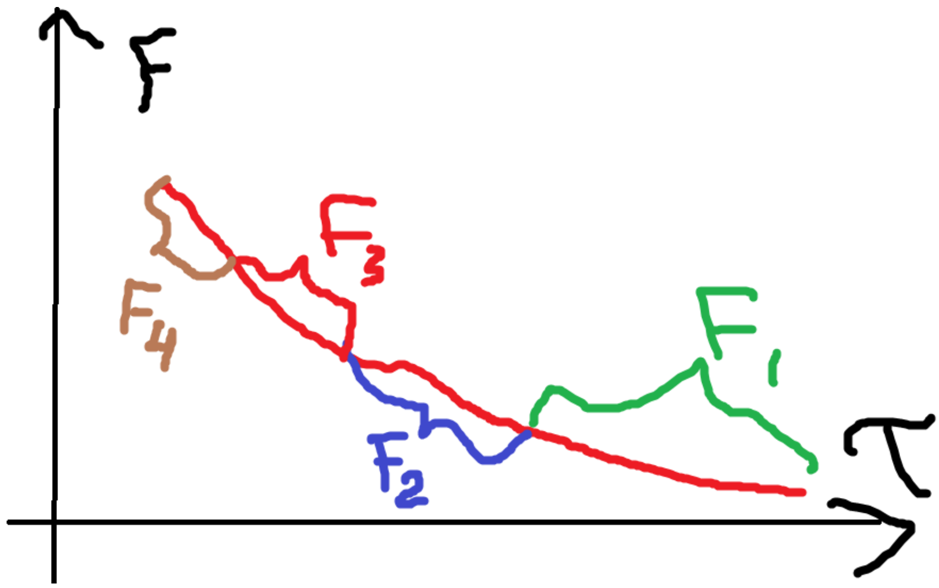
Мы:

Вариант 1: Маловато итераций. Ведь

$$F_1(\vec{r}, \vec{v}, t) = F_0(\vec{r}, \vec{v}) - \tau\left(\vec{v}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}\frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}}\right)$$

это лишь первая итерация решения кинетического уравнения. А может, нам лучше подойдёт вторая - $F_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$?

Все эти приближения в шаге по τ. Чем ближе мы к положению равновесия, тем меньший порядок мы можем использовать:



Так что нет, первого порядка нам здесь достаточно.

Вариант 2: Мы считали концентрацию и температуру электронов везде одинаковой. Это тоже приближение, но оно не так сильно нам всё попортило.

А ответ – электроны суть существенно квантовые частицы, поэтому распределение Максвелла для них неприменимо. Нужно распределение Ферми-Дирака.

31. С помощью кинетического уравнения с релаксационным членом в приближении τ = const оценить коэффициент внутреннего трения термически однородного классического газа.

Задача 55.

С помощью кинетического уравнения с релаксационным членом в приближении $\tau = const$ и $\lambda = const$ рассчитать коэффициент внутреннего трения термически однородного классического газа.

Тут надо вспомнить результат эксперимента Ньютона: касательное напряжение пропорционально нарастанию скорости с коэфом пропорциональности – вязкое трение:

$$\frac{F_{\text{тр}}}{S} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial z}$$

В нашей задаче $\frac{\partial v_x}{\partial z} = a = const$

Перепишем это как сумму по всем возможным $\frac{\partial v_x}{\partial z}$, используя F1:

$$\frac{F_{\text{тр}}}{S} = \eta \int_0^l dz \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial v_x}{\partial z} F_1(v_x, z) dv_x$$

Естественно, мы будем пользоваться готовым результатом:

$$F_1(z, v, t) = w(v)\left(n(z) - \tau\left(v\frac{\partial n(z)}{\partial z} + \frac{\partial U}{\partial z}\frac{mv}{\theta}\right)\right)$$

Опять n(z)=const, поэтому

$$F_1(z, v, t) = w(v)\left(n - \tau\frac{\partial U}{\partial z}\frac{mv}{\theta}\right)$$

Но тут нас ждёт засада: нужно использовать не обычное распределение Максвелла, а смещённое, т.е. вводить $\vec{v} = \vec{v} - \vec{u} = \{v_x - az, v_y, v_z\}$

С помощью метода «никто всё равно не будет смотреть промежуточные выкладки» мы придём к вот такому:

$$\frac{F_{\text{тр}}}{S} = a * \frac{\tau n m^2}{\theta} < v_x^2 >< v_z^2 >$$

Опять надо подставить средний квадрат скорости, который равен $\frac{\theta}{m}$. Тогда

$$\frac{F_{\text{тр}}}{S} = a * \frac{\tau n m^2}{\theta} * \left(\frac{\theta}{m}\right)^2 = a\tau n\theta$$

Сравним с

$$\frac{F_{\text{тр}}}{S} = \eta a$$

И делаем логичный вывод

$$\eta = n\tau\theta$$