

Сільвейстр А.М., Моклюк М.О.

ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА

Частина 2

Статистична фізика і термодинаміка

Ядерна фізика

Електронна теорія речовини

Курс лекцій

для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів
педагогічних закладів вищої освіти

Вінниця
«ТВОРИ»
2024

УДК 530(075.1)

DOI: <https://doi.org/10.31652/978-966-924-520-5-2-1-502>

C36

Рекомендовано до друку Вченою радою Вінницького державного педагогічного університету імені Михайла Коцюбинського.

(Протокол № 8 від 24.01.2024 року).

Рецензенти:

Мельничук О.В., доктор фізико-математичних наук, професор, проректор з наукової роботи та міжнародних зв'язків, професор кафедри інформаційних технологій, фізико-математичних та економічних наук Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя.

Касіяненко В.Х. доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики Вінницького національного технічного університету.

Сільвейстр А.М., Моклюк М.О.

С 36 Теоретична фізика: У 2 частинах. Частина 2. Статистична фізика і термодинаміка. Ядерна фізика. Електронна теорія речовини: Курс лекцій для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів педагогічних закладів вищої освіти. Вінниця, ТОВ «Твори», 2024. 502 с.

ISBN 978-966-924-520-5

В посібнику розглядаються теоретичні основи статистичної фізики і термодинаміки, ядерної фізики та електронної теорії речовини. Значне місце в ньому відведено основним поняттям і законам, які вивчаються у даних розділах теоретичної фізики.

Посібник призначений для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів педагогічних закладів вищої освіти, а також для слухачів та викладачів, які цікавляться розвитком теоретичної фізики.

УДК 530(075.1)

ISBN 978-966-924-520-5

© А.М. Сільвейстр, М.О. Моклюк, 2024.

ЗМІСТ

Вступ	13
Розділ 1. СТАТИСТИЧНА ФІЗИКА І ТЕРМОДИНАМІКА	17
Лекція 1. Основні поняття та принципи статистичної фізики і термодинаміки	18
§1. Вступ. Основні поняття і терміни	18
§2. Історія розвитку молекулярно-кінетичної теорії	19
§3. Два методи вивчення макроскопічних об'єктів (процесів)	21
§4. Макроскопічне та мікроскопічне описання макроскопічної системи	22
Лекція 2. Функція статистичного розподілу в фазовому просторі	24
§5. Фазовий простір	24
§6. Функція розподілу в фазовому просторі	28
§7. Макроскопічні величини як фазові середні мікроскопічних змінних	30
§8. Теорема Ліувілля	31
Лекція 3. Канонічні розподіли	34
§9. Зв'язок статистичного розподілу з адитивними законами збереження	34
§10. Постулат рівномірності станів термодинамічної рівноваги - мікроканонічний розподіл	37
§11. Квазінезалежні системи. Канонічний розподіл Гіббса	41
§12. Аналіз канонічного розподілу Гіббса	45
§13. Великий канонічний розподіл Гіббса	47
Лекція 4. Деякі співвідношення статистичної фізики ...	49
§14. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга і квантування фазового простору	49
§15. Канонічний розподіл Гіббса в квантовій статистиці ...	51
§16. Врахування квантової нерозпізнаності мікрочастинок	52
Лекція 5. Зв'язок статистики з термодинамікою	54
§17. Статистичне означення ентропії системи	54
§18. Поняття вільної енергії системи	56
§19. Основне рівняння рівноважної статистичної термодинаміки (перший закон термодинаміки) як	

наслідок канонічного розподілу	57
Лекція 6. Термодинамічні параметри та їх зв'язки	59
§20. Зв'язок термодинамічних параметрів із зовнішніми параметрами системи. Узагальнена сила.	59
§21. Зв'язок термодинамічних параметрів з вільною енергією системи. (Формула Гіббса-Гемгольца)	62
Лекція 7. Перший закон термодинаміки та його особливості	63
§22. Функції стану і функції процесу	63
§23. Перший закон термодинаміки для елементарних процесів	66
§24. Перший закон термодинаміки для скінченних і замкнутих процесів. Поняття про вічний двигун першого роду	67
Лекція 8. Другий закон термодинаміки для рівноважних процесів	68
§25. Рівноважні процеси. Оборотні та необоротні процеси	68
§26. Другий закон термодинаміки для рівноважних (квазістатичних) процесів	71
§27. Ентропія як міра хаосу, міра інформації системи	73
§28. Закон зростання ентропії	75
Лекція 9. Другий закон термодинаміки для нестатичних процесів	79
§29. Другий закон термодинаміки для нестатичних процесів	79
§30. Нерівність Клаузіуса або другий закон термодинаміки для нестатичних процесів і неізольованих систем	81
§31. Фізичні наслідки другого закону термодинаміки. Поняття про вічний двигун другого роду	83
Лекція 10. Колові процеси (цикли) та їх особливості	84
§32. Цикл Карно	85
§33. Цикл Карно в координатах TS	87
§34. Основна термодинамічна тотожність	88
§35. Максимальна робота процесу	89
§36. Критика теорії теплової смерті Всесвіту	89
Лекція 11. Термодинаміка теплових процесів	90
§37. Принцип дії теплових двигунів, холодильних машин та теплових насосів	90
§38. Поршневі двигуни внутрішнього згорання	93

§39. Цикл Отто	93
§40. Цикл Дизеля	94
§41. Цикл Трінклера	95
Лекція 12. Температурні властивості фізичних систем...	96
§42. Поняття температури	96
§43. Відносні температурні шкали	97
§44. Абсолютна температурна шкала	99
§45. Статистична температура	102
§46. Термодинамічна шкала температур	103
§47. Поняття про цінність внутрішньої енергії	105
Лекція 13. Термодинамічні функції	106
§48. Термодинамічні характеристичні функції (внутрішня енергія, вільна енергія, термодинамічний потенціал Гіббса, ентальпія)	107
§49. Залежність термодинамічних потенціалів від числа частинок	112
Лекція 14. Тепловий закон та його наслідки	114
§50. Теплова теорема Нернста. (Третій закон термодинаміки)	114
§51. Наслідки теореми Нернста	116
Лекція 15. Рівняння стану ідеального газу	119
§52. Виведення рівняння стану ідеального газу	119
§53. Термодинамічні функції та рівняння стану ідеального газу	122
Лекція 16. Розподіл Максвелла	123
§54. Поняття про статистичний розподіл	124
§55. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за проєкціями їх імпульсу (швидкості)	125
§56. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за модулем їх імпульсу (швидкості)	130
§57. Експериментальна перевірка розподілу Максвелла	134
§58. Дослід Штерна	136
Лекція 17. Розподіл Максвелла-Больцмана	137
§59. Розподіл Максвелла-Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за швидкостями та координатами)	138
§60. Класична статистика Максвелла-Больцмана для ідеального газу	141
Лекція 18. Розподіл Больцмана	143
§61. Розподіл Больцмана. (Розподіл молекул ідеального	

газу за координатами)	143
§62. Барометрична формула і експериментальне визначення сталої Больцмана	147
Лекція 19. Закон рівномірного розподілу енергії за ступенями вільності в класичній статистиці	149
§63. Теорема про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності	149
§64. Застосування теореми про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності	151
Лекція 20. Теорія теплоємності газів	155
§65. Теплоємність як функція процесу	155
§66. Зв'язок між молярними теплоємностями C_p і C_v	156
§67. Класична теорія теплоємності газів	159
§68. Квантова теорія теплоємності	162
§69. Застосування статистичної суми для розрахунку теплоємності за станом однієї частинки	171
§70. Обговорення результатів розрахунку теплоємності газів	177
Лекція 21. Реальний газ	179
§71. Реальний газ. Статистичний інтеграл для реальних газів в наближенні парних зіткнень	179
§72. Наближені вирази для термодинамічних функцій реального газу	182
§73. Рівняння Ван дер Ваальса	188
Лекція 22. Рівновага фаз. Фазові переходи	191
§74. Екстремальні властивості термодинамічного потенціалу Гіббса	192
§75. Поняття про різні фази речовини	193
§76. Умови рівноваги фаз	194
§77. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Рівновага систем: тверде тіло-рідина, рідина-газ	196
Лекція 23. Особливості фазових переходів	199
§78. Критична точка. Рівновага трьох фаз речовини. Потрійна точка	199
§79. Багатокомпонентні системи. Правило фаз Гіббса	203
§80. Фазові переходи 1-го і 2-го роду. Поведінка термодинамічних величин та їх похідних у фазових переходах	205
Лекція 24. Канонічні розподіли в квантовій статистиці	207

§81. Визначення мікростану системи в квантовій статистичній фізиці	207
§82. Мікроканонічний розподіл в квантовій статистичній фізиці	208
§83. Квантовий канонічний розподіл Гіббса	209
§84. Великий квантовий канонічний розподіл Гіббса	212
Лекція 25. Закономірності квантової статистики	213
§85. Квантовий ідеальний газ	214
§86. Симетричні та антисиметричні стани	215
§87. Числа заповнень	217
Лекція 26. Квантові розподіли	219
§88. Функція розподілу за мікростанами для ферміонів і бозонів	219
§89. Аналіз розподілів Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна	223
§90. Розподіл Гіббса в напівпровідниках	228
§91. Порівняння квантових і класичного розподілів	231
Лекція 27. Поведінка вироджених газів та рівноважне електромагнітне випромінювання	235
§92. Електронний газ в металі	235
§93. Рівноважне випромінювання як ідеальний газ фотонів	236
Лекція 28. Основи теорії флуктуацій	243
§94. Поняття про флуктуації	243
§95. Принцип Больцмана. Розподіл Гаусса	244
§96. Флуктуації адитивних величин для макроскопічних систем	246
§97. Флуктуації основних термодинамічних величин	250
Лекція 29. Основи кінетики нерівноважних процесів	254
§98. Кінетичне рівняння Больцмана	254
§99. Явища переносу	258
§100. Основні положення термодинаміки нерівноважних систем	260
Питання для контролю та перевірки знань з статистичної фізики і термодинаміки	263
Рекомендована література з статистичної фізики і термодинаміки	266
Розділ 2. ЯДЕРНА ФІЗИКА	267
Лекція 30. Вступ до ядерної фізики	268
§101. Предмет ядерної фізики. Історичні етапи її розвитку. Ядерна модель атома за Резерфордом. Протонно-	

нейтронна модель ядра. Ядерна фізика і фізика елементарних частинок	268
§102. Фундаментальна взаємодія між частинками: електромагнітна, гравітаційна, сильна і слабка взаємодії	270
§103. Опис стану руху елементарних частинок. Закони збереження у перетворенні ядер та елементарних частинок	273
Лекція 31. Основні характеристики атомного ядра	274
§104. Будова атомного ядра. Основні властивості та характеристики нуклонів	275
§105. Заряд атомного ядра. Досліди Мозлі	276
§106. Маса атомного ядра та способи її визначення. Енергія зв'язку та дефект маси атомного ядра. Ізобари, ізотопи, ізотони	278
§107. Розміри ядра і способи їх визначення	283
Лекція 32. Радіоактивний розпад ядер	285
§108. Загальні закономірності радіоактивного розпаду ядер. Рівняння стану вікової рівноваги	285
§109. α -радіоактивний розпад. Експериментальні особливості α -розпаду	287
§110. Теорія α -радіоактивного розпаду. Визначення радіуса ядра на її основі	290
§111. β -радіоактивний розпад і його теорія	292
§112. γ -випромінювання ядер. Тривалість життя збудженого ядра. Метастабільні стани збудженого ядра	298
§113. Ефект Мессбауера	299
Лекція 33. Ядерні сили	302
§114. Основні характеристики ядерних сил	302
§115. Елементарна теорія дейтрона	305
§116. Нуклон. Нуклонні взаємодії та визначення радіуса дії ядерних сил	310
§117. Обмінний характер ядерних сил	312
Лекція 34. Модель атомних ядер	314
§118. Краплинна модель ядра. Формула Вайцзекера	314
§119. Труднощі краплинної моделі. Розповсюдженість ізотопів у метagalактиці. Спін ядра. Магнітні та електричні моменти атомних ядер	316
§120. Оболонкова модель ядра	319
Лекція 35. Ядерні реакції і їх класифікація	320

§121. Типи ядерних реакцій	321
§122. Символіка під час запису ядерних реакцій	322
§123. Класифікація ядерних реакцій за енергією, за родом реагуючих ядер і частинок, за характером ядерних перетворень	324
§124. Ефективний переріз σ ядерних реакцій. Функція збудження ядер $\sigma(E)$	326
Лекція 36. Основні закономірності ядерних реакцій	328
§125. Характер протікання ядерної реакції за Бором. Компаунд-ядро (складне) і його характеристики	328
§126. Гіпотеза Бора про незалежність розпаду компаунд- ядра від способу його одержання	329
§127. Резонансні явища у ядерних перетвореннях. Ширина Γ енергетичного рівня і зв'язок її з дискретними ймовірностями розпаду збудженого ядра. Повна ширина енергії збудження та повна ймовірність розпаду ядра ...	330
§128. Формула Брета-Вігнера для опису резонансних функцій збудження ядра	332
§129. Шляхи вивільнення ядерної енергії для потреб народного господарства: а) ядерний синтез; б) реакції поділу важких ядер	333
Лекція 37. Реакції поділу важких ядер. Ядерний реактор	335
§130. Стійкість масивних ядер. Умова стійкості ядра. Порогова енергія поділу - енергія активації ядра	335
§131. Збудження масивних ядер нейтронами і умова їх поділу. Можливість викликання реакції поділу нейтронами в ядерних ізотопах	338
§132. Оцінка вивільнення енергії під час ділення ядра $^{235}_{92}\text{U}$	341
§133. Пояснення високої β -активності новостворених ядер-продуктів поділу ядра урану $^{235}_{92}\text{U}$	343
§134. Ланцюгова реакція в ядерних реакторах. Коефіцієнт розмноження нейтронів у ядерному реакторі. Реактори на швидких нейтронах (брідер)	346
Лекція 38. Термоядерні реакції. Дослідження керованих термоядерних реакцій	348
§135. Термоядерні реакції синтезу і умови їх протікання. Опис кількох конкретних термоядерних реакцій з відміткою про їх енергетичний вихід	348

§136. Вивільнення енергії у ядерних реакціях синтезу як фундаментальна проблема сучасної фізики. Обґрунтування цієї проблеми з позиції сучасних проблем народного господарства	350
§137. Керовані термоядерні реакції в магнітних пастках. Критерій фізичного порогу термоядерної реакції. Критерій Лоусона	351
§138. Загальна схема лазерного термоядерного і холодного синтезу атмосфери ${}^2_1\text{H}$ і ${}^3_1\text{H}$	354
Лекція 39. Елементарні частинки	355
§139. Елементарні частинки та їх основні характеристики. Класифікація елементарних частинок	356
§140. Закони збереження у перетвореннях елементарних частинок	359
§141. Початкові відомості про структуру нуклонів	363
§142. Поняття про систематику елементарних частинок. Гіпотеза про кварки	366
Питання для контролю та перевірки знань з ядерної фізики	370
Рекомендована література з ядерної фізики	372
Розділ 3. ЕЛЕКТРОННА ТЕОРІЯ РЕЧОВИНИ	374
Лекція 40. Вступ до електронної теорії речовини	375
§143. Предмет і завдання електронної теорії речовини	375
§144. Історія розвитку вчення про електронну теорію речовини	376
§145. Методи дослідження електронної теорії речовини ...	386
Лекція 41. Тверді тіла та їх властивості	389
§146. Типи зв'язків атомів в твердих тілах: іонний, ковалентний, металічний, молекулярний (Ван дер Ваальсівський), водневий та їх особливості	389
§147. Геометрія кристалічної ґратки	394
Лекція 42. Зонна теорія твердих тіл	400
§148. Зонна структура енергетичного спектру носіїв заряду кристалів	400
§149. Рівняння Шредінгера для кристалу	402
§150. Обернена ґратка. Зони Бріллюєна	410
Лекція 43. Динаміка кристалічної ґратки	412
§151. Коливання простої одномірної ґратки	413
§152. Коливання складної одномірної ґратки	417

§153. Нормальні координати для простої одновірної ґратки	422
§154. Коливання тривимірної ґратки	424
Лекція 44. Метод квазічастинок	426
§155. Фоони	426
§156. Дисперсія фоонів і її дослідження за допомогою розсіювання нейтронів	428
§157. Електрон-фоонна взаємодія	430
Лекція 45. Теплоємність твердих тіл для високих і низьких температур	434
§158. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Ейнштейном)	434
§159. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Дебаєм)	436
Лекція 46. Магнітні властивості речовини	441
§160. Магнітні характеристики середовища	442
§161. Діамагнетики	443
§162. Діамагнетизм Ландау	446
§163. Парамагнетизм іонів, атомів і молекул	448
§164. Спіновий парамагнетизм Паулі	450
§165. Феромагнетизм	451
§166. Обмінна природа феромагнетизму	453
Лекція 47. Квантові генератори	453
§167. Лазери	453
§168. Гелій-неоновий лазер	458
§169. Хімічні лазери	458
§170. Напівпровідникові лазери	459
Лекція 48. Надпровідність і надтекучість	460
§171. Надпровідність	461
§172. Високотемпературна надпровідність	461
§173. Ефект Мейснера	462
§174. Квантова рідина	463
§175. Надтекучість рідкого гелію	464
Лекція 49. Плазмовий стан речовини	465
§176. Основні характеристики плазми	465
§177. Електричне поле в плазмі	468
§178. Плазма в магнітному полі	470
§179. Плазмовий стан речовини в природі	474
§180. Фізика плазми та перспективи її застосування	475

Лекція 50. Теоретична фізика і фізична картина світу.	
Методологія фізики	476
§181. Завдання, предмет і методи теоретичної фізики.	
Структура фізичної теорії	477
§182. Роль експерименту в теоретичній фізиці.	
Фундаментальні фізичні сталі	481
§183. Фізична картина світу та її особливості	483
§184. Світоглядне значення курсу теоретичної фізики	487
Питання для контролю та перевірки знань з	
електронної теорії речовини	490
Рекомендована література з електронної теорії	
речовини	492
Предметний покажчик	493

ВСТУП

Завданням курсу теоретичної фізики в педагогічних закладах вищої освіти є узагальнення широкого кола фізичних фактів, створення у майбутніх учителів фізики можливо більш повного представлення про сучасну картину світу. Для цього перш за все необхідно вивчати фундаментальні фізичні теорії. До них, як правило, входить статистична фізика і термодинаміка. Ця наука показує, як пов'язані різноманітні властивості макроскопічних тіл з їхньою внутрішньою будовою і рухом частинок, з яких складаються ці тіла, а також встановлює закономірності теплових й інших явищ, у яких беруть участь макроскопічні об'єкти.

Сучасна статистична фізика і термодинаміка пройшла довгий шлях розвитку. В її основі лежать представлення про те, що всі макроскопічні системи складаються із великого числа дрібних частинок: атомів, молекул, елементарних частинок.

Між статистичною фізикою і термодинамікою існує велика відмінність у підходах до вивчення явища. Статистична фізика виходить із певного представлення про структуру об'єкта, про властивості і рух частинок, що складають його, із відомостей про внутрішню мікроскопічну природу явища.

Термодинаміка, навпаки, вивчає свої об'єкти феноменологічно, описуючись лише їхніми макроскопічними характеристиками. Але вказані підходи не протирічать один одному: закони термодинаміки можуть бути обґрунтовані за допомогою методів статистичної фізики.

Тому вчителю фізики необхідно володіти обома способами вивчення макроскопічних систем. Указані міркування визначають сучасний підхід до курсу статистичної фізики і термодинаміки у педуніверситеті.

Вивчення курсу ядерної фізики має важливе значення у практиці суспільства. Ядерна фізика - наука про будову, властивості та перетвореннях атомного ядра. Вона є однією із наймолодших наук. Так у кінці XIX ст. нічого не було відомо про атомне ядро, а сам атом вважався найдрібнішою неподільною частинкою речовини.

Ядерна модель атома прекрасно пояснює результати дослідів з вивчення розсіювання α -частинок і є великим кроком вперед на шляху до пізнання будови матерії. Рік створення ядерної моделі атома можна вважати роком народження ядерної фізики.

Вивчення будови ядра та його складових елементів можливе тільки на основі вивчення ядерних реакцій. Для проведення ядерних

реакцій необхідні засоби прискорення та детектування частинок. Тому невід'ємними підрозділами ядерної фізики є фізика прискорювачів і фізика детекторів.

Ядерна фізика має принципове значення для багатьох розділів астрофізики (первинний нуклеосинтез, термоядерні реакції в зорях як під час життя на головній послідовності, так і після сходу з неї), і, очевидно, для ядерної енергетики.

Електронна теорія речовин вивчає фізичні властивості тіл, що зумовлені рухом і взаємодією електрично заряджених об'єктів - електронів, протонів, йонів тощо. Особлива роль електронів визначається тим, що з усіх відомих на той час частинок електрон має найменшу масу і найменший заряд.

Реакція електронів на зовнішні електричні і магнітні дії суттєво визначає фізико-хімічні властивості речовини. Тому фундаментальне визначення речовини пов'язане з характером впливу електронів на формування цих властивостей. Крім того, явища, які вивчає електронна теорія речовин, відіграють першорядну роль у науково-технічному прогресі і особливо у створенні фундаментальної бази для розвитку сучасної електроніки.

В даному посібнику розглядаються теоретичні основи статистичної фізики і термодинаміки, ядерної фізики, електронної теорії речовини. Значне місце в ньому відведено основним поняттям і законам, які вивчаються у даних розділах теоретичної фізики. Систематизовано викладено програмний матеріал з статистичної фізики і термодинаміки, ядерної фізики та електронної теорії речовини.

У розділі «Статистична фізика і термодинаміка» приділено увагу основним поняттям і принципам статистичної фізики та законам термодинаміки. В основу курсу покладено два методи дослідження макроскопічних систем: статистичний і термодинамічний. Причому ці методи не виключають, а доповнюють один одного.

Курс статистичної фізики і термодинаміки вивчає властивості рідин і газів, поведінку електронів у металах і електромагнітного випромінювання в порожнині, хід хімічних реакцій, фазові переходи тощо. Діапазон її застосування дуже широкий і простягається від атомних ядер до Всесвіту в цілому. За енергетичною шкалою він охоплює не менше десяти порядків, починаючи від явищ у рідкому гелію і надпровідниках за низьких температур та закінчуючи

процесами високотемпературної плазми. Таким чином, світ не може бути пізнаний без цієї фізичної теорії.

Статистична фізика і термодинаміка, як окремий розділ теоретичної фізики інтенсивно розвивається і в наші дні. Відбувається значний прогрес як у розробці основ цих наук, так і в різноманітних додатках, які включають все більш ширше коло проблем. Отримують розв'язки задач, які багато років цікавили фізиків, які мають велике теоретичне і практичне значення. Наприклад, успіхи в теорії фазових переходів і критичних явищах. Перспективні статистичні і термодинамічні дослідження в області астрофізики й біофізики.

«Ядерна фізика» як окремий розділ теоретичної фізики вивчає: властивості ядер і радіоактивного випромінювання; ядерні взаємодії; ядерні сили й елементарні частинки.

Під час розгляду основних властивостей атомних ядер звертається увага на: заряд, масу, енергію зв'язку, радіус, спіні, магнітний момент, парність хвильової функції й електричний квадрупольний момент.

У вивченні радіоактивного випромінювання звертається увага на основні закони радіоактивності зокрема, α -розпад, β -розпад і γ -випромінювання ядер, а також внутрішня конверсія електронів, ядерна ізомерія, ефект Мессбауера тощо.

Розвиток прискорювальної техніки дав можливість вченим взятися за розв'язання найважчої задачі ядерної фізики - вивчення проблеми ядерних сил. Існування стабільних ядер, що складаються із нейтронів і протонів, говорить про те, що окрім кулонівського відштовхування протонів повинні існувати потужні ядерні сили притягання між будь якою парою нуклонів.

Уявлення про елементарні частинки історично виникло в процесі пошуків найдрібніших частинок речовини, що є носіями його фундаментальних властивостей. Спочатку такими частинками вважали молекули, потім атоми, пізніше, коли стало відомо про складну будову атома і атомного ядра, елементарними стали називати ті частинки, що входять до них: електрони, протони і нейтрони, а також частинки, що випускаються під час перетворення атомних ядер: позитрони, фотони, нейтрино і антинейтрино. Кожну із цих частинок природно було вважати елементарною, так як ні одну з них неможна було «скласти» з інших.

Розділ «Ядерна фізика» розрахований на майбутніх учителів

фізики, які вивчають ядерну фізику та мають бажання поповнити свої знання з даної галузі науки. Разом з тим автори намагалися викласти обширний і складний матеріал сучасної ядерної фізики в простій і наглядній формі за рахунок виключення складних питань.

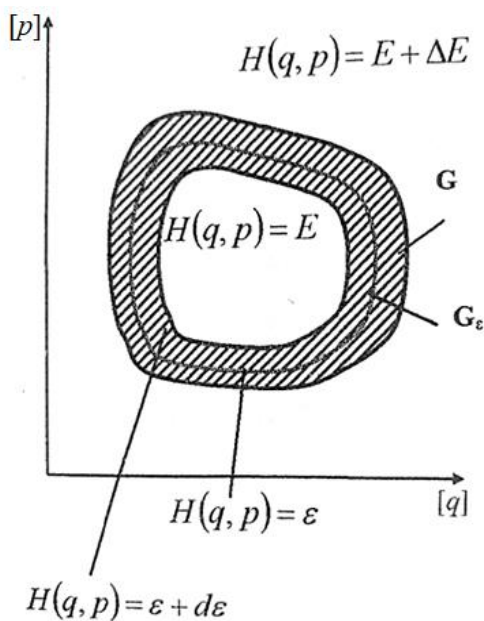
«Електронна теорія речовини» як один із розділів теоретичної фізики спирається на явища, що мають першочергове значення для науково-технічного прогресу. В даному курсі розглядаються питання зонної теорії твердих тіл, динаміка кристалічної ґратки, електронний газ в металах, властивості напівпровідників, магнітні властивості речовини, надпровідність і надтекучість, плазмовий склад речовини, квантова радіофізика тощо. Тобто для адекватного опису електронних властивостей речовини звертається увага на деякі загальні риси періодичних структур.

Курс електронної теорії речовини займає важливе місце в системі підготовки майбутніх учителів фізики. Зокрема, в цьому курсі здобувачі вищої освіти отримують уявлення про те, як різні розділи теоретичної фізики (класична механіка, електродинаміка, статистична фізика і термодинаміка, квантова механіка та ін.) застосовуються спільно під час вивчення фізичних властивостей речовини.

Даний посібник призначений для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів педагогічних закладів вищої освіти, а також для слухачів та викладачів, які цікавляться розвитком теоретичної фізики.

Розділ 1.

СТАТИСТИЧНА ФІЗИКА І ТЕРМОДИНАМІКА



Лекція 1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА ПРИНЦИПИ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ І ТЕРМОДИНАМІКИ

§1. Вступ. Основні поняття і терміни.

§2. Історія розвитку молекулярно-кінетичної теорії.

§3. Два методи вивчення макроскопічних об'єктів (процесів).

§4. Макроскопічне та мікроскопічне описання макроскопічної системи.

[1. §4.1; 2. §1.1; 3. В., §1; 5. §2.1, §2.2; 6. В., §1-§3; 7. §1, §18; 8. В., §I.1, §I.2, §II.1]

§1. Вступ. Основні поняття і терміни

Макроскопічна система - система, що складається з великої кількості мікрооб'єктів або частинок. Наприклад, число Авогадро $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}$.

Ідеальний газ - це така модель газу, коли молекули або атоми вважають матеріальними точками, що не взаємодіють між собою - (відсутні сили притягання і відштовхування, але співудари відбуваються по закону пружного удару) та перебувають у безладному хаотичному русі - тепловому русі.

Термодинамічний або макроскопічний параметр системи - це така величина, що описує стан системи - в цілому (для ідеального газу p, V, T).

Стан термодинамічної рівноваги:

1. Це такий стан, в який рано, чи пізно приходить система за відсутності дії із зовні.

2. Це такий стан, в якому відсутні потоки енергії, тепла, маси, заряду і так далі.

Адитивні термодинамічні параметри - це такі параметри, величина яких пропорційна числу частинок в системі. Наприклад, внутрішня енергія системи:

$$U \sim n, U = \frac{3}{2} nkT;$$

напруженість електричного поля:

$$E \sim n, E = \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0\epsilon r_i^2}.$$

Адитивні параметри називають ще *екстенсивними*.

Інтенсивні термодинамічні параметри - це параметри, які

вводяться для макроскопічної системи, але не залежать від числа частинок. Наприклад, температура.

§2. Історія розвитку молекулярно-кінетичної теорії

Уявлення про те, що всі тіла побудовані з дрібних частинок - атомів, виникло ще в глибоку давнину і було достатньо, і чітко висловлено давньогрецькими філософами Левкіппом (роки життя невідомі), Демокрітом (близько 460 - 370 р. до н.е.), Епікуром (341 - 270 р. до н.е.) та римським мислителем Лукрецієм Каром (близько 96 - 55 р. до н.е.). В результаті аналізу спостережень і філософських роздумів було зроблено висновок, що тіла Всесвіту складаються з найдрібніших неподільних частинок - атомів. За їхнім вченням, уся природа, розмаїтність світу складається з маленьких частинок матерії, атомів, які рухаються, стикаються і сполучаються у порожньому просторі. Ці атоми (буття) і пустота (небуття) є першоосновою матеріального світу. Відомий такий афоризм Демокріта: «У світі немає нічого, крім атомів і пустоти, все інше вигадка».

В основі атомного вчення Левкіппа, Демокріта, Епікура лежать три принципи: збереження матерії, збереження форм (або видів) матерії та існування пустоти. Вчення грецьких атомістів викладено у своєрідній поетичній енциклопедії античних знань - поемі Лукреція Кара «Про природу речей», яка дійшла до наших часів.

Відродження атомізму починається разом з швидким розвитком природознавства в XVII ст. Ідею про атомну будову речовини відновлює французький філософ П. Гассенді (1592 - 1655). Прибічником атомної гіпотези був також англійський фізик Р. Бойль (1627 - 1691). Англійський вчений І. Ньютон (1643 - 1727) вважав, що всі тіла складаються з маленьких частинок, які мають масу і які є міцними, непроникними, рухомими. Відомий швейцарський фізик Д. Бернуллі (1700 - 1782) висловив уявлення про атомну будову для пояснення властивостей газів.

Однак, пізніше ці атомістичні погляди були забуті і відродились лише в другій половині XVII століття, а потім в XVIII - XIX століттях розроблені М. Ломоносовим, Д. Дальтоном, Р. Кренігом, Л. Больцманом, Д. Максвеллом та іншими в якості наукової теорії, яка отримала назву класичної молекулярно-кінетичної теорії (МКТ). Ця теорія ґрунтується на наступних положеннях:

1. Всі речовини складаються із дуже маленьких окремих частинок - молекул. Молекули в свою чергу складаються із ще

менших частинок - атомів.

2. Між молекулами тіла одночасно діють сили взаємного притягання (зчеплення) і сили взаємного відштовхування.

3. Молекули, що утворюють тіло, знаходяться в стані неперервного неупорядкованого руху.

В середині XVIII ст. М.В. Ломоносов (1711 - 1765) сформулював молекулярну гіпотезу. Він вважав, що всі тіла складаються з дрібних «невідчутних частинок», які є матеріальними, непроникними. Вводиться поняття прості та складні частинки.

Іншу важливу проблему, яку вдалося розробити М.В. Ломоносову, - це кінетичну теорію теплоти, яка якісно описувала фізичні особливості теплових явищ. За визначеннями М.В. Ломоносова в середині XVIII століття на природу теплоти існувало два погляди. Згідно одного - теплота розглядалась, як деяка «тонка невагома матерія», присутність якої в тілі обумовлює його нагрітість: чим більше цієї «матерії» утримується в тілі, тим вища його температура. Згідно другої точки зору, причина теплоти складається в невидному русі дрібних частинок - атомів, із яких складаються тіла.

Більшість вчених в XVIII столітті додержувались першої точки зору і лише небагато, найбільш прозорливі, виступали на захист атомістичного вчення. Серед них був і М.В. Ломоносов, який в своїх працях поклав основи кінетичної теорії теплоти і газів. Ця теорія викладена в працях «Роздуми про причини теплоти і холоду» (1750 р.), «Дослід теорії пружності повітря».

Після встановлення другого закону термодинаміки перед фізиками постала ще одна проблема - пояснити цю закономірність на основі молекулярних представлень про будову речовини.

Атомно-молекулярна гіпотеза знайшла переконливе підтвердження на початку XIX ст. в хімії. Це сталося на основі відкриття закону сталості складу і закону кратних відношень. Англійський фізик і хімік Д. Дальтон (1766 - 1844) пояснив це тим, що в хімічних реакціях атоми речовини сполучаються за різних співвідношень атомів у молекули.

У фізиці молекулярно-кінетичні уявлення набули визнання лише в другій половині XIX ст., коли у працях німецького фізика Р. Клаузіуса (1822 - 1888), англійського фізика Д. Максвелла (1831 - 1879) і австрійського фізика Л. Больцмана (1844 - 1906) були розроблені основи кінетичної теорії газів. Видатний австрійський

фізик Л. Больцман вперше пояснив, що ця проблема може бути розв'язана лише шляхом теорії ймовірності до молекулярного руху, і встановив, що другий закон термодинаміки має статистичний характер. Про що говориться у праці «Другий закон механічної теорії тепла». Р. Клаузіус свої погляди на теорію тепла виклав у книзі «Механічна теорія тепла». Історія розвитку молекулярно-кінетичної теорії розглянута в книзі С. Карно (1796 - 1832) «Роздуми про рухому силу вогню і про машини, які здатні розвивати цю силу».

Повністю реальність існування молекул було доведено лише на початку XX ст. у працях французького фізика Ж. Перрена (1870 - 1942), польського фізика М. Смалуховського (1872 - 1917), фізика-теоретика А. Ейнштейна (1879 - 1955), присвячених вивченню броунівського руху мікрочастинок.

Фізика теплових явищ довгий час розвивалася незалежно від статистичної фізики. В результаті Л. Больцман і Дж. В. Гіббс (1839 - 1903) - американський фізик-теоретик знайшли статистичне пояснення термодинаміки. Праці Дж. В. Гіббса в галузі хімічної термодинаміки та статистичної механіки були написані на рубежі минулих двох століть. Він також є одним з творців векторного числення в його сучасному вигляді. Зміст робіт Дж. В. Гіббса такий, що вони безпосередньо переносяться в квантову теорію, хоча і автор виходив із класичних уявлень.

Значний внесок у розвиток молекулярно-кінетичної теорії речовини зробили вчені України: М.М. Авенаріус (1835 - 1895), М.О. Умов (1846 - 1915), М.М. Бекетов (1827 - 1911), М.М. Міллер (1848 - 1910), І.П. Пулюй (1845 - 1918) та ін.

§3. Два методи вивчення макроскопічних об'єктів (процесів)

1. *Термодинамічний метод.* Суть цього методу полягає у встановленні зв'язків між макроскопічними параметрами системи. Цей метод ніяким чином не заглиблюється в мікроструктуру системи, тобто не опирається на МКТ і отже, не може розкрити глибинні причини явища. *Перевага* цього методу: відносна простота. Основний *недолік*: обмеженість термодинаміки.

2. *Статистичний метод.* На відміну від термодинамічного цей спосіб опису системи полягає в тому, що характеристики макроскопічної системи як цілого розраховуються на основі інформації про кожний мікрооб'єкт такої системи. Статистично

описати ідеальний газ означає, що виходячи з інформації про молекулярну будову такого газу, про рух молекул, їх швидкість, робиться висновок про макроскопічний параметр такого газу, наприклад, тиск. Таким чином, згідно статистичного методу, термодинамічний параметр системи представляє собою усереднене значення відповідної йому мікроскопічної величини. Беззаперечною перевагою цього методу полягає в тому, що він розглядає природу явищ, виходячи із поведінки мікрооб'єктів з яких складаються макроскопічні системи.

Недоліки: 1) Складність. 2) Висновки статистичного методу справедливі з точністю до моделі. Якщо модель вибрана погано, то й висновки будуть неправильні і чим краща модель, тим висновки вірніші.

Перевага: базуючись на атомно-молекулярному вченні, статистичний метод дає можливість бачити діалектичний розвиток наших уявлень про світ, підтверджуючи тим самим його матеріальність.

Отже, *статистична фізика* - це наука, яка вивчає системи, які складаються з великої кількості мікрооб'єктів. Основне її *завдання*: визначення усереднених параметрів системи на основі інформації про кожний мікрооб'єкт системи.

§4. Макроскопічне та мікроскопічне описання макроскопічної системи

1. *Макроскопічний опис.* Описати макросистему з макроскопічної точки зору означає задати термодинамічні параметри, що описують цю систему в цілому та зв'язки між ними (для ідеального газу потрібно задати p, V, T і рівняння стану $pV = NkT$).

Макроскопічні параметри поділяються на *зовнішні* і *внутрішні*.

Параметри, що визначаються розміщенням в просторі і характером руху частинок, що не належать до системи, яка досліджується, називаються *зовнішніми*. Наприклад, об'єм V - зовнішній параметр, тому що він визначається розміщенням стінок посудини (а вони не належать до системи, що досліджується), напруженість зовнішнього електричного поля $\vec{E}$, індукція зовнішнього магнітного поля $\vec{B}$.

Параметри, що визначаються характером руху і розміщенням в просторі частинок самої системи, називаються *внутрішніми*. Наприклад, густина, тиск, енергія та ін. - визначаються інтенсивністю

теплогового руху частинок системи.

2. *Мікроскопічний опис.* Описати систему з мікроскопічної точки зору це означає описати стан кожної мікрочастинки, що входить до системи. З класичної точки зору, це означає, що треба задати координати та проекції імпульсу частинки в кожний момент часу. Коли ці величини будуть задані, то можна говорити, що задано мікростан системи.

Якщо x_i, y_i, z_i координати довільної i -ої частинки системи (вважаємо, що всі частинки є матеріальними точками і їх кількість N), то сукупність величин:

$$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N \quad (4.1)$$

буде задавати нам положення частинки в даний момент часу - буде задавати конфігурацію системи. Якщо v_{ix}, v_{iy}, v_{iz} - проекції швидкостей довільної i -ої частинки, то сукупність:

$$v_{1x}, v_{1y}, v_{1z}, v_{2x}, v_{2y}, v_{2z}, \dots, v_{Nx}, v_{Ny}, v_{Nz} \quad (4.2)$$

буде задавати нам проекції швидкості в даний момент часу.

Якщо маса m стала, то сукупність величин (4.1), (4.2) задає нам мікростан системи. Координаті кожної частинки і в цілому їх сукупності можна співставити так звані узагальнені координати.

Якщо s число ступенів вільності системи, то очевидно, що сукупність s узагальнених координат

$$q_1, q_2, \dots, q_s \quad (4.3)$$

буде співставлена сукупності (4.1). Кожній узагальненій координаті q_i можна співставити узагальнений імпульс p_i

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad (4.4)$$

де L - функція Лагранжа системи; $\dot{q}_i$ - узагальнена швидкість ($\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$).

Очевидно, що зв'язок між компонентами швидкості в декартовій системі координат та узагальненими імпульсами є взаємно однозначним. Тоді сукупність величин

$$p_1, p_2, \dots, p_s \quad (4.5)$$

буде еквівалентна сукупності величин (4.2) і визначає проекції швидкості (імпульсу) кожної частинки системи.

Отже, сукупність величин виразів (4.3), (4.5) буде визначати координати і проекції імпульсу кожної частинки системи та буде еквівалентна виразам (4.1), (4.2).

Тоді сукупність виразів (4.3), (4.5) буде теж задовольняти мікростан системи. Таким чином, *для того, щоб задати мікростан макроскопічної системи, необхідно задати узагальнені координати та узагальнені імпульси всіх частинок системи.*

Очевидно, що мікрооб'єкти, з яких складається система, рухаються, то координати й імпульси кожної частинки будуть функціями часу:

$$q_i = q_i(t); p_i = p_i(t).$$

Отже, мікростан системи весь час буде змінюватись. Будемо називати *безмежно близькими* такі мікростани, в яких система перебувала в моменти часу від t до $t + dt$.

Лекція 2. ФУНКЦІЯ СТАТИСТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ В ФАЗОВОМУ ПРОСТОРИ

§5. Фазовий простір.

§6. Функція розподілу в фазовому просторі.

§7. Макроскопічні величини як фазові середні мікроскопічних змінних.

§8. Теорема Ліувілля.

[1. §4.2, §4.5, Д. IV; 2. §1.3, §1.4, §1.7; 3. §2; 5. §2.3; 6. §4-§7; 7. §19; 8. §II.2-§II-4]

§5. Фазовий простір

В класичній механіці для опису стану системи вводять поняття *фазового простору*, такого простору на осях якого відкладемо координати і проекції імпульсу частинки.

Ми введемо поняття фазового або Γ простору, як простору на осях якого відкладемо координати і проекції імпульсу кожної частинки системи. Якщо s число ступенів вільності системи, то фазовий Γ простір $2s$ -мірний.

Очевидно, якщо мікрооб'єкти вважаються матеріальними точками, то $s = 3N$, тоді фазовий простір буде $6N$ -мірний. Таким чином, точка в фазовому просторі (фазова точка) буде нам задавати координати і проекції імпульсів кожної частинки системи. Отже, задає мікростан системи.

Тобто, мікростан системи буде зображатись точкою в фазовому

просторі, яку називають *фазовою точкою*.

Оскільки мікростан системи весь час змінюється через рух мікрооб'єктів, то фазова точка в фазовому просторі буде рухатись, описуючи фазову траєкторію.

Домовимось зображати фазовий простір на площині так: одну координатну вісь співставимо s -осям координат і позначимо $[q]$; другу вісь співставимо s -осям імпульсам і позначимо $[p]$. Тоді, сукупність узагальнених координат домовимось позначати буквою q :

$$q_1, q_2, \dots, q_s \Rightarrow q,$$

а сукупність узагальнених імпульсів:

$$p_1, p_2, \dots, p_s \Rightarrow p.$$

Тоді фазова точка в фазовому просторі буде мати координати q, p (див. рис. 1).

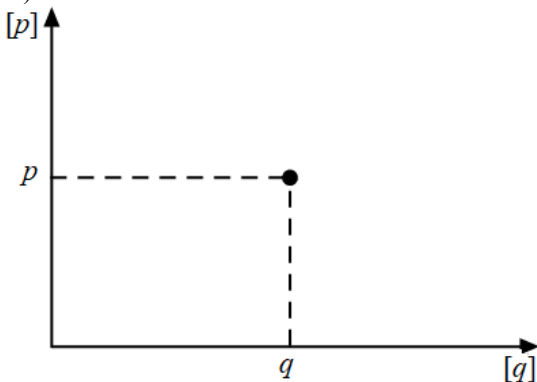


Рис. 1

Введемо поняття об'єму фазового простору:

$$d\Gamma = dq_1, dq_2, \dots, dq_s, dp_1, dp_2, \dots, dp_s \equiv dqdp \quad (5.1)$$

Будемо зображати елемент фазового простору так, як зображено на рисунку 2.

Оскільки q і p змінюються в силу руху мікрочастинки, то закони їх зміни знаходяться з рівнянь Гамільтона:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (5.2)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (5.3)$$

Розв'язок цієї системи диференціальних рівнянь дає нам

$$\begin{cases} q_i = q_i(t); \\ p_i = p_i(t). \end{cases} \quad (5.4)$$

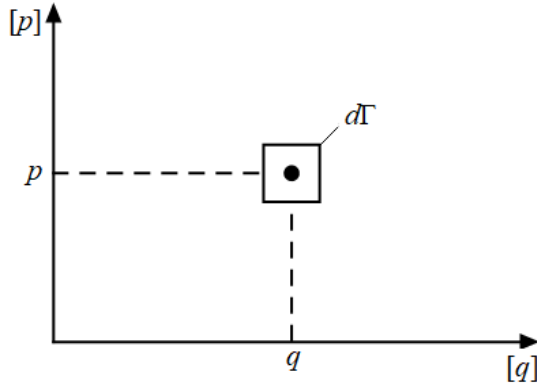


Рис. 2

В сукупності вирази (5.4) є параметричними рівняннями фазової траєкторії. *Фазова траєкторія* - це лінія, яку описує фазова точка в фазовому просторі. На рисунку 3 зображена фазова траєкторія у фазовому просторі.

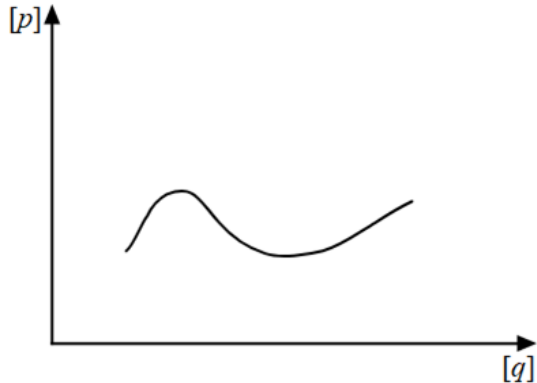


Рис. 3

В рівняння (5.4) входять $2s$ - константи інтегрування, які можна визначити, задавши параметри початкового мікростану. Легко показати, що фазова траєкторія немає точок самоперетину і для даної системи фазові траєкторії не перетинаються. Показати це можна спираючись на теорему Коші (див. рис. 4).

Точки A і B - відповідні початкові умови системи. Припустимо,

що траєкторії перетинаються в точці C . Це означає, що в точці C мікростан і однієї і другої системи співпадає. Якщо фазові траєкторії перетнулися в точці C , то тоді порушиться теорема єдності розв'язку диференціальної системи рівнянь. Це означає, що еволюція абсолютно однакових систем (в точці C - мікростан співпадає), іде по різному, що протирічить фізичним уявленням. Фазова траєкторія, що відповідає одній системі не може самоперетинатись, хоча фазові траєкторії можуть бути замкнутими.

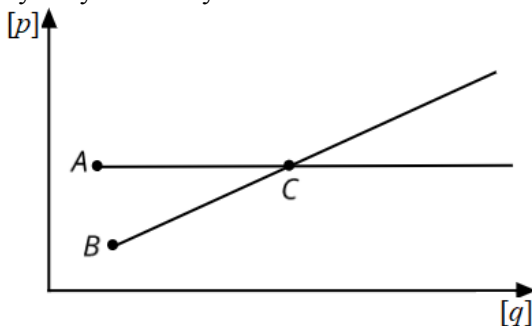


Рис. 4

Найзручніше описувати стан термодинамічної рівноваги, коли термодинамічні параметри не залежать від часу. Тобто, макростан системи залишається постійним, але частинки весь час рухаються. Мікростан системи весь час змінюється, хоча макростан однаковий.

Отже, кожному макростану системи відповідає дуже велика кількість різних мікростанів, але серед різних макростанів стан термодинамічної рівноваги реалізується найбільшим числом мікростанів системи. В стані термодинамічної рівноваги хаотичність рухів найбільша.

Таким чином, можна сказати, що для кожного даного макростану термодинамічні параметри системи в даний момент часу будуть залежати від мікростану системи, а на великому проміжку часу термодинамічний параметр буде представляти собою усереднене за часом значення відповідної йому величини. Наприклад, тиск газу, це є усереднене значення сили, що діє на стінку одиничної площі.

Введемо поняття статистичного ансамблю системи. *Статистичний (або фазовий) ансамбль* - це сукупність систем, що перебувають в різних мікростанах, але макростан яких однаковий.

Статистичний ансамбль системи можна уявити собі як набір великого числа макроскопічних копій даної системи, що перебувають

в різних мікростанах. Відзначимо, що різні макростани системи (наприклад, рівноважні і нерівноважні) можуть бути реалізовані різним числом мікростанів (тобто, різним макростанам системи відповідає різне число мікростанів). У цьому випадку окремі макростани будуть тим *стійкішими*, чим більшим числом мікростанів вони можуть бути реалізовані. Оскільки найстійкішим є стан термодинамічної рівноваги, то цьому макростану відповідає найбільше число мікростанів.

§6. Функція розподілу в фазовому просторі

Точно сказати в якому мікростані перебуває система неможливо, оскільки неможливо задати координати і імпульс частинки. Вважаючи, що кожний мікростан системи є подія випадкова, будемо описувати поведінку макросистеми та її мікростану, використовуючи ймовірнісні закономірності.

Введемо деяку функцію мікростану і часу:

$$\rho(q, p, t) = \rho(q_1, q_2, \dots, q_s, p_1, p_2, \dots, p_s, t), \quad (6.1)$$

яка має такий фізичний зміст:

- задає густину ймовірності того, що фазова точка системи в даний момент часу перебуває в околі точки фазового простору з координатами (q, p) ;

- задає густину ймовірності того, що координати і проекції імпульсів кожної частинки лежать в межах:

$$\begin{aligned} & [x_1, x_1 + dx_1][x_2, x_2 + dx_2] \dots [x_N, x_N + dx_N] \\ & [y_1, y_1 + dy_1][y_2, y_2 + dy_2] \dots [y_N, y_N + dy_N]; \\ & [z_1, z_1 + dz_1][z_2, z_2 + dz_2] \dots [z_N, z_N + dz_N] \\ & [p_{1x}, p_{1x} + dp_{1x}][p_{2x}, p_{2x} + dp_{2x}] \dots [p_{Nx}, p_{Nx} + dp_{Nx}] \\ & [p_{1y}, p_{1y} + dp_{1y}][p_{2y}, p_{2y} + dp_{2y}] \dots [p_{Ny}, p_{Ny} + dp_{Ny}] \\ & [p_{1z}, p_{1z} + dp_{1z}][p_{2z}, p_{2z} + dp_{2z}] \dots [p_{Nz}, p_{Nz} + dp_{Nz}] \end{aligned} \quad (6.2)$$

- задає густину ймовірності, що фазова точка системи має координати і імпульси, що лежать в межах:

$$[q, q + dq]; [p, p + dp].$$

Вказана ймовірність записується у вигляді:

$$dW(q, p, t) = \rho(q, p, t) dq dp = \rho(q, p, t) d\Gamma, \quad (6.3)$$

де dW - це не диференціал, а відображення ймовірності реалізації окремого мікростану.

Тоді

$$\rho(q, p, t) = \frac{dW(q, p, t)}{dqdp}. \quad (6.4)$$

Функція $\rho(q, p, t)$ називається *функцією розподілу за різними мікростанами системи* і задає нам густину ймовірності різних мікростанів системи.

Запишемо деякі співвідношення. Зобразимо в фазовому просторі деяку область $\Delta\Gamma$ (див. рис. 5). Тоді ймовірність попадання фазової точки в об'єм $\Delta\Gamma$ запишеться:

$$W_{\Delta\Gamma} = \int_{\Delta\Gamma} \rho(q, p, t) dqdp. \quad (6.5)$$



Рис. 5

Ця ймовірність є функцією від часу, якщо фізичні умови змінюються, а якщо не змінюються, то вона не буде функцією від часу.

Розглянемо 2s-мірний інтеграл в межах всього фазового простору від функції розподілу, тобто за всіма допустимими значеннями q та p :

$$W = \int_{\substack{\text{по всьому} \\ \text{фазовому} \\ \text{простору}}} \rho(q, p) dqdp. \quad (6.6)$$

Інтеграл (6.6) дає ймовірність перебування фазової точки в усьому фазовому просторі, тобто дає ймовірність достовірної події. Тому цей інтеграл повинен дорівнювати одиниці:

$$\int_{\substack{\text{по всьому} \\ \text{фазовому} \\ \text{простору}}} \rho(q, p) dqdp = 1. \quad (6.7)$$

Вираз (6.7) називається *умовою нормування функції розподілу*. Домовимося на далі в інтегралі по всьому фазовому просторі не

вказувати границі інтегрування. Тоді вираз (6.7) будемо записувати:

$$\int \rho(q, p) dq dp = 1. \quad (6.8)$$

Вираз (6.8) це означений інтеграл і він береться в межах всього фазового простору, тобто за всіма допустимими значеннями координат та проекцій імпульсів всіх частинок системи.

§7. Макроскопічні величини як фазові середні мікроскопічних змінних

Основна ідея статистичної фізики полягає в тому, що всі фізичні властивості систем обумовлені рухом і взаємодією частинок з яких складається система. Звідси, як наслідок, слідує те, що всі фізичні величини, які характеризують систему повинні залежати від мікростану цієї системи. Наприклад, повна енергія системи дорівнює сумі кінетичної і потенціальної, звідки повна енергія визначається мікростаном системи. Внутрішня енергія системи визначається швидкостями та взаємним розміщенням частинок, тобто визначається мікростаном системи. Вектор поляризації всієї системи буде визначатись взаємним розташуванням полярних молекул та їх орієнтацією в просторі, а також швидкістю їх руху, тобто, теж буде залежати від мікростану системи.

Отже, для довільної величини A можна записати, що A є функцією мікростану системи

$$A = A(q(t), p(t), t). \quad (7.1)$$

Щоб знайти залежність величини A від часу, треба знати $q(t)$ і $p(t)$, тобто треба знати фазову траєкторію системи. Так як число частинок в системі дуже велике, то залежність A від t , буде мати нерегулярний характер. Як правило, на практиці цікавляться не миттєвими, а усередненими значеннями фізичної величини (див. рис. 6).

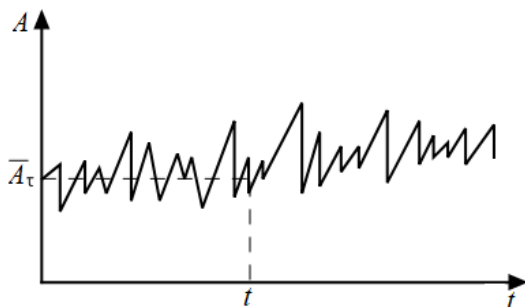


Рис. 6

Введемо поняття середнього значення $\bar{A}_\tau$ на інтервалі τ за співвідношенням, згідно якого середнє значення буде:

$$\bar{A}_\tau \tau = \int_0^\tau A(q(t), p(t)) dt. \quad (7.2)$$

Отже,

$$\bar{A}_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(q(t), p(t)) dt. \quad (7.3)$$

Істинне середнє значення, очевидно, буде задаватись співвідношенням:

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(q(t), p(t)) dt. \quad (7.4)$$

Щоб знайти $\bar{A}$ за формулою (7.4) треба знати рівняння фазової траєкторії $q(t)$ і $p(t)$. Для макросистеми це рівняння знайти неможливо із-за великої кількості ступенів вільності. Тому, середні значення фізичних величин, що характеризують систему, повинні належати великій кількості мікрооб'єктів. Це базується на тому, що мікростан системи є подія випадкова.

Розглянемо математичне сподівання величини $\tilde{A}$

$$\tilde{A} = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp. \quad (7.5)$$

Величина $\tilde{A}$ є середнім значенням величини A , що взяте за різними значеннями. Це середнє статистичне значення фізичної величини $A(q, p)$ або середнє значення фізичної величини $A(q, p)$ за фазовим ансамблем з функцією розподілу $\rho(q, p)$.

В статистичній фізиці вводиться припущення, що носить назву ергодної, або ергодичної гіпотези. Одне з формулювань полягає в тому, що середнє за часом $\bar{A}$ і середнє за фазовим ансамблем $\tilde{A}$ рівні ($\bar{A} = \tilde{A}$). Строго кажучи, ергодна гіпотеза не доведена.

Отже, з сприйняттям ергодної гіпотези, виникає можливість розрахувати середнє значення фізичної величини, що характеризує систему, але для цього необхідно знати функцію розподілу $\rho(q, p)$.

§8. Теорема Ліувілля

Розглянемо деякі співвідношення, яким задовольняє функція

розподілу $\rho(q, p)$. Нехай деяка система перебуває в стані термодинамічної рівноваги, де $\rho(q, p, t)$ функція розподілу цієї системи за різними мікростанами, тобто густина ймовірності за різними мікростанами системи. Розглянемо статистичний ансамбль, що відповідає даній системі, тобто велике число макроскопічно тотожних копій, що відрізняються лише мікростанами. Мікростан кожної копії з ансамблю буде зображатись в фазовому просторі точкою. Густина таких точок в фазовому просторі позначимо $\delta(q, p, t)$. Очевидно, що

$$\delta(q, p, t) \sim \rho(q, p, t). \quad (8.1)$$

Так як число фазових точок, кожна з яких відповідає копії з ансамблю стало, то зручно записати закон збереження фазових точок. З цього закону ми отримаємо дуже важливе значення функції розподілу. Для цього скористаємося законом збереження електричного заряду. Нагадаємо, що закон збереження електричного заряду в електродинаміці мав такий вигляд:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0, \quad (8.2)$$

де ρ - густина електричного заряду: $\rho = \rho(x, y, z)$; $\vec{j}$ - густина струму: $\vec{j} = \rho \vec{v}$; v - швидкість руху електричних зарядів: $v = v(x, y, z, t)$.

Узагальнюючи (8.2) для руху фазових точок в фазовому просторі, можна записати:

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} + \text{div} \delta \vec{v} = 0, \quad (8.3)$$

де $\vec{v} = \vec{v}(q, p, t)$ - швидкість руху фазових точок; $\text{div} \delta \vec{v}$ - узагальнена дивергенція в $2s$ -мірному просторі.

Нагадаємо, що:

$$\text{div} \vec{a} = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z}, \quad (8.4)$$

а узагальнена

$$\text{div} \vec{a} = \frac{\partial a_1}{\partial q_1} + \frac{\partial a_2}{\partial q_2} + \dots + \frac{\partial a_s}{\partial q_s} + \frac{\partial a_{s+1}}{\partial p_1} + \frac{\partial a_{s+2}}{\partial p_2} + \dots + \frac{\partial a_{2s}}{\partial p_s}. \quad (8.5)$$

За визначенням статистичного ансамблю:

$$\delta(q, p, t) = C \rho(q, p, t), \quad (8.6)$$

де C - константа.

Підставивши вираз (8.6) у вираз (8.3) і скоротивши на константу C , отримаємо:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{a} = 0. \quad (8.7)$$

Зауважимо, що компоненти вектора швидкості $\vec{v}$ в тривимірному просторі такі:

$$\vec{v} \equiv \vec{v}\{\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}\}.$$

Компоненти вектора швидкості руху фазової точки в фазовому $2s$ -мірному просторі за аналогією будуть такими:

$$\vec{v} \equiv \vec{v}\{\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_s, \dot{p}_1, \dot{p}_2, \dots, \dot{p}_s\}.$$

З врахуванням цього вираз (8.7) перепишеться:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} \right) = 0. \quad (8.8)$$

Продиференціюємо добутки у виразі (8.8):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \rho \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = 0. \quad (8.9)$$

Легко бачити, що друга сума дорівнює нулю у виразі (8.9). Дійсно врахувавши рівняння Гамільтона, маємо:

$$\sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0,$$

$$\text{де } \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

В результаті вираз (8.9) набуде вигляду:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0. \quad (8.10)$$

Цей вираз представляє повну похідну від ρ по t . Отже, вираз (8.10) запишеться:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (8.11)$$

Вираз (8.11) описує теорему Ліувілля. *Фізичний зміст виразу (8.11) - функція розподілу вздовж фазової траєкторії не змінюється.* Сказане означає, що є зміст шукати функцію розподілу, оскільки вона незмінна протягом її еволюції, якщо система перебуває в стані термодинамічної рівноваги.

Дамо інше трактування теореми Ліувілля (див. рис 7). Оскільки в околі кожної фазової точки $\rho = \text{const}$, якщо переміщуватись разом з нею вздовж фазової траєкторії, то густина фазових точок також не буде змінюватись. Інакше кажучи, *що фазові точки переміщуються як нестислива рідина і об'єм, який вони займають, з часом не*

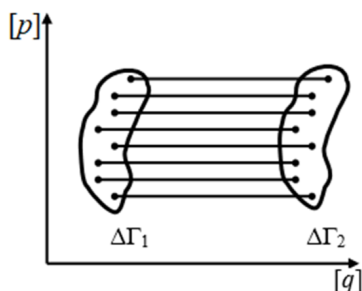


Рис. 7

змінюється, хоча форма його може бути різною.

Важливість теореми Ліувілля в тому, що якщо буде відома ймовірність перебування фазової точки в якій небудь момент часу в деякому об'ємі фазового простору, то вона буде такою ж і для іншого моменту часу. В силу цього, з'являється можливість замість початкових умов, що

використовувались в механіці, прийняти статистичне припущення про рівномірність станів, які зображаються елементами фазового простору рівного об'єму, що лежать на фазовій траєкторії.

Лекція 3. КАНОНІЧНІ РОЗПОДІЛИ

§9. Зв'язок статистичного розподілу з адитивними законами збереження.

§10. Постулат рівномірності станів термодинамічної рівноваги - мікроканонічний розподіл.

§11. Квазінезалежні системи. Канонічний розподіл Гіббса.

§12. Аналіз канонічного розподілу Гіббса.

§13. Великий канонічний розподіл Гіббса.

[1. §4.6, §4.6, §5.6; 2. §1.6, §1.8, §3.1-§3.4; 3. §4-§6; 5. §3.1-§3.3; 6. §8-§12; 7. §20, §21, §38; 8. §II.5-§II.8, §II.10]

§9. Зв'язок статистичного розподілу з адитивними законами збереження

З теореми Ліувілля безпосередньо слідує, що функція розподілу ρ залежить від таких комбінацій q і p , що роблять сталою її в часі. Такі величини в механіці називаються *інтегралами руху*. Отже, функція розподілу є інтегралом руху, причому таким, що залежить від відомих механічних інтегралів руху. Проаналізуємо, якою повинна бути ця залежність, для цього на далі будемо вважати систему ізольованою, тобто такою, що не взаємодіє з оточуючим середовищем.

Якщо s - число ступенів вільності системи, то така система має $2s$ інтегралів руху. Тобто для розв'язку $2s$ рівнянь Гамільтона необхідно задати $2s$ початкових умов. Тому в загальному випадку можемо записати, що ρ є функція двох інтегралів руху

$$\rho = \rho(A_1(q, p), A_2(q, p), \dots, A_{2s}(q, p)). \quad (9.1)$$

Покажемо, що насправді ρ залежить тільки від адитивних інтегралів руху. Всього є 7 адитивних інтегралів руху. Зрозуміло з врахуванням проекції вектора імпульсу системи $\vec{P}(q, p)$ та вектора моменту імпульсу системи $\vec{M}(q, p)$:

$$\begin{cases} H(q, p) = \text{const}; \\ \vec{P}(q, p) = \text{const}; \\ \vec{M}(q, p) = \text{const}. \end{cases} \quad (9.2)$$

Рівняння (9.2) виражають відомі закони збереження, які є наслідками симетрії простору і часу. Перше з рівнянь (9.2) виражає закон збереження енергії (який є наслідком однорідності часу), друге - закон збереження імпульсу (який є наслідком однорідності простору), третє - закон збереження моменту імпульсу (який є наслідком ізотропності простору (незалежність від напрямку)).

Для доведеного вище факту введемо поняття статистично незалежних підсистем. Дві підсистеми називаються *статистично незалежними*, якщо між їх мікростанами немає ніякої кореляції (залежності), тобто коли мікростани в одній системі є події незалежні. Очевидно, що дві не взаємодіючі системи завжди незалежні (рис. 8).

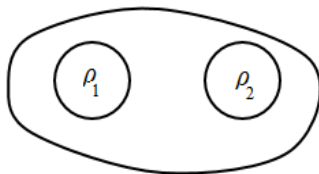


Рис. 8

Якщо ρ_1, ρ_2 функції розподілу статистично незалежних систем, то за теоремою множення ймовірностей функція розподілу системи, яка містить дві попередніх системи, що не взаємодіють між собою, має вигляд добутку функцій розподілу обох систем:

$$\rho = \rho_1 \cdot \rho_2. \quad (9.3)$$

Прологарифмуємо вираз (9.3):

$$\ln \rho = \ln \rho_1 + \ln \rho_2. \quad (9.4)$$

З теореми Ліувілля відомо ρ - це інтеграл руху. Отже, $\ln \rho$ теж

буде інтегралом руху і адитивним. Це означає, що $\ln p$ повинен залежати від відомих механічних адитивних інтегралів руху і ця залежність повинна бути лінійна. В силу цього функція розподілу може мати вигляд:

$$\ln p = \alpha + \beta H(q, p) + \vec{\gamma} \vec{P}(q, p) + \vec{\delta} \vec{M}(q, p), \quad (9.5)$$

де α - адитивна константа; $\beta, \vec{\gamma}, \vec{\delta}$ - деякі константи, причому $\vec{\gamma}$ та $\vec{\delta}$ скалярно перемножуються на відповідні вектори у виразі (9.5).

Кажуть, що вираз (9.5) - це *найбільш загальна залежність функції розподілу від адитивних інтегралів руху*. Оскільки в статистичній фізиці не розглядається обертання системи та переміщення системи як цілого, то можна вибрати

$$\vec{P}(q, p) = 0; \quad \vec{M}(q, p) = 0. \quad (9.6)$$

Тоді рівняння (9.5) набуває такого вигляду:

$$\ln p(q, p) = \alpha + \beta \cdot H(q, p). \quad (9.7)$$

Отже, функція розподілу ізольованої системи повністю визначається тільки одним інтегралом руху - *інтегралом повної енергії системи*. Тобто, якщо буде відома повна енергія можна знайти функцію розподілу системи.

Висновок. За динамічного підходу для розрахунку середнього значення фізичної величини ми користувалися виразом:

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} A(q(t), p(t)) dt. \quad (9.8)$$

Для точного розв'язання задачі необхідно було знати рівняння фазової траєкторії, а для цього необхідно знати $2s$ початкових координат. Якби це все можна було знати, то можна б сказати, в якому мікростані перебувала б система в будь який момент часу $q = q(t)$, $p = p(t)$. Як ми вже з'ясували, знайти це рівняння навіть в принципі неможливо.

За статистичного підходу ми записували рівняння у вигляді:

$$\bar{A} = \int A(q, p) \rho(q, p) dp dq. \quad (9.9)$$

З виразу (9.9) видно, що необхідно знати функцію розподілу $\rho(q, p)$, а для цього треба задати набагато меншу інформацію, тільки функцію Гамільтона. Очевидно, функція Гамільтона заміняє $2s$ початкових даних, але так як інформації буде задаватись набагато менше, то результат буде отриманий не точний (ймовірнісний). Тобто ми в цьому випадку сказали, що система буде перебувати тільки з тією чи іншою ймовірністю. Отже, ми вияснили, що функція розподілу $\rho(q, p)$ це є $\rho(H(q, p))$. Тобто можна записати:

$$\rho(q, p) = \rho(H(q, p)).$$

Але конкретний вигляд цієї функції ми будемо визначати для різних систем окремо. Найпростіший вигляд функція розподілу буде мати для ізольованої системи.

§10. Постулат рівноймовірності станів термодинамічної рівноваги - мікроканонічний розподіл

Розглянемо ізольовану систему, тобто функцію розподілу ізольованої системи. Під *ізольованою системою* ми розуміємо систему, яка не обмінюється з навколишнім середовищем ні енергією, ні частинками.

Статистичний ансамбль систем, які мають однакові зовнішні параметри, однакову енергію та однакове число частинок, називається *мікроканонічним ансамблем*.

Повна енергія цієї системи є величина стала, тобто

$$H(q, p) = E = \text{const.}$$

Зобразимо в фазовому просторі поверхню постійної енергії (див. рис. 9). Це така поверхня в околі якої лежать всі мікростани, що реалізують певне задане значення енергії. Очевидно, що всі ці мікростани, що лежать на постійній енергії рівноймовірні, оскільки вони усі реалізують одне і те ж саме значення енергії.

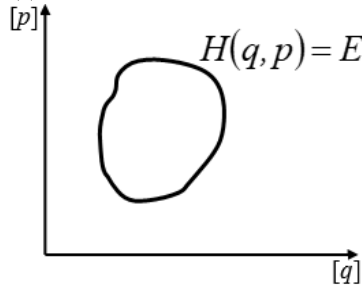


Рис. 9

Отже, функція розподілу ізольованої системи, тобто густина ймовірності мікростанів на поверхні повинна бути постійною, а за межами цієї поверхні повинна дорівнювати нулю ($\rho = 0$). Дане твердження представляє собою *постулат рівноймовірності станів* вздовж поверхні однакової енергії.

Дамо математичне обґрунтування вище сказаному. Оскільки, строго ізолювати систему важко, то очевидно, що повна енергія системи запишеться таким чином:

$$E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E, \quad (10.1)$$

причому $\Delta E \rightarrow 0$.

Зобразимо тепер дві поверхні постійної енергії, що задаються рівняннями:

$$\begin{aligned} H(q, p) &= E; \\ H(q, p) &= E + \Delta E. \end{aligned}$$

На рисунку 10 зображені ці поверхні постійної енергії у фазовому просторі.

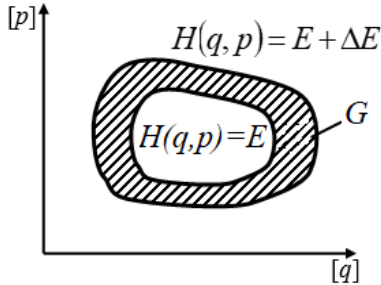


Рис. 10

У статистичній фізиці робиться припущення про те, що всі мікростани, які лежать на поверхні постійної енергії ізолюваної системи, мають одну і ту ж ймовірність (якщо система знаходиться в стані термодинамічної рівноваги). Це припущення також називають *ергодною гіпотезою*.

Очевидно, що фазова точка системи буде перебувати в області G . Тоді в силу постулату ймовірності станів, враховуючи те, що з математичної точки зору цьому стану відповідає функція розподілу, що має постійне значення в області фазового простору між двома поверхнями постійної енергії та нульове значення за межами цієї області, можна записати функцію розподілу, яка матиме вигляд:

$$\rho(q, p) = \begin{cases} \text{const, якщо } E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E; \\ 0, \text{ якщо } H(q, p) < E, \quad H(q, p) > E + \Delta E. \end{cases} \quad (10.2)$$

Вираз (10.2) називається *мікроканонічним розподілом*. Його фізичний зміст полягає в тому, що функція розподілу $\rho(q, p)$ дає густину ймовірності того, що фазова точка системи лежить в околі певного мікростану $[q, q + dq]$; $[p, p + dp]$.

Надамо тепер мікроканонічному розподілу (10.2) дещо іншого вигляду (див. рис. 11). Для цього розглянемо дельта (δ) функцію Дірака

$$\delta(x - a) = \begin{cases} \text{const}, & x = a; \\ 0, & x \neq a. \end{cases}$$

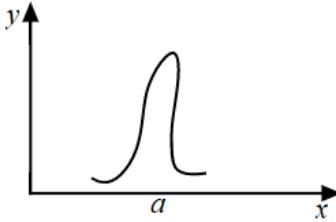


Рис. 11

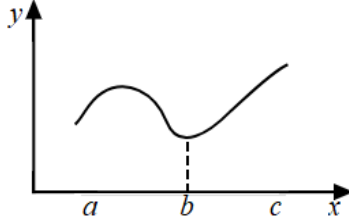


Рис. 12

Ця функція має такі властивості (див. рис. 12):

$$\int_a^b f(x) \delta(x - c) dx = \begin{cases} f(c), & \text{якщо } a \leq c \leq b; \\ 0, & \text{якщо } c < a, c > b. \end{cases} \quad (10.3)$$

З врахуванням цього мікроканонічний розподіл можна записати у вигляді:

$$\rho(q, p) = C \delta(H(q, p) - E), \quad (10.4)$$

де C - константа нормування.

Константа C знаходиться з умови нормування мікроканонічного розподілу.

$$C \int \delta(H(q, p) - E) dq dp = 1. \quad (10.5)$$

Розв'язавши рівність (10.5), знайдемо константу нормування C :

$$C = \frac{1}{\Omega(E)}, \quad (10.6)$$

де Ω - це об'єм кільця.

Таким чином, нормований мікроканонічний розподіл має такий вигляд:

$$\rho(q, p) = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H(q, p) - E) \quad (10.7)$$

або

$$\rho(q, p) = \frac{\delta(H(q, p) - E)}{\Omega(E)} \quad (10.7a)$$

Маючи функцію розподілу $\rho(q, p)$ можна обчислити середнє значення фізичної величини для статистичного ансамблю ізольованих систем мікроканонічного ансамблю. Тепер середнє значення:

$$\bar{L} = \int L(q, p) \rho(q, p) dq dp; \quad (10.8)$$

$$\bar{L} = \int L(q, p) \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H(q, p) - E) dq dp, \quad (10.8a)$$

де $L(q, p)$ - значення величини в мікростані (q, p) ; $\bar{L}$ - середнє значення фізичної величини.

Покажемо, що середнє значення функції Гамільтона дорівнює енергії $\overline{H(q, p)} = E$.

Запишемо вираз для середнього значення функції Гамільтона:

$$\overline{H(q, p)} = \int H(q, p) \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H(q, p) - E) dq dp. \quad (10.9)$$

Для обчислення інтегралу (10.9) розіб'ємо, як і раніше, весь фазовий простір поверхнями постійної енергії на кільця (див. рис. 13).

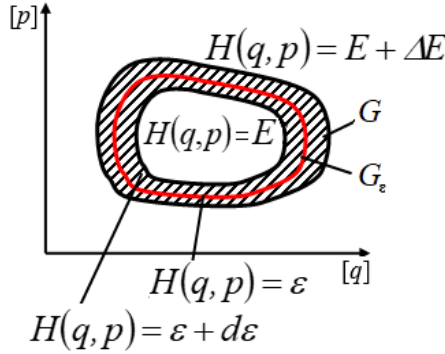


Рис. 13

Виділимо кільце G_ε . Інтегрування проведемо в два етапи. Спочатку від G_ε по кільцю, а потім по всім таким різним кільцям ε .

$$\begin{aligned} \overline{H(q, p)} &= \int H(q, p) \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H(q, p) - E) dq dp = \\ &= \int \int_{\text{по } \varepsilon \text{ по } G_\varepsilon} H(q, p) \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H(q, p) - E) dq dp = \\ &= \int \int_{\text{по } \varepsilon \text{ по } G_\varepsilon} \varepsilon \frac{1}{\Omega(E)} \delta(\varepsilon - E) dq dp = \\ &= \int_{\text{по } \varepsilon} \varepsilon \frac{1}{\Omega(E)} \delta(\varepsilon - E) \int_{G_\varepsilon} dq dp = \\ &= \frac{1}{\Omega(E)} \int \varepsilon \delta(\varepsilon - E) \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\Omega(E)} E \Omega(E) = E, \end{aligned} \quad (10.10)$$

де $H(q, p) = \mathcal{E}$; $\int_{G_{\mathcal{E}}} dqdp = \Omega(\mathcal{E})$.

Таким чином, вибрана нами функція розподілу дає розумний і логічно очікуваний результат для середнього значення енергії. Аналогічним способом можна обчислити константу нормування C :

$$C \int \delta(H - E) dqdp = 1. \quad (10.11)$$

$$\begin{aligned} C \int \delta(H - E) dqdp &= C \int_{\text{по } \mathcal{E}} \int_{G_{\mathcal{E}}} \delta(H - E) dqdp = \\ &= C \int_{\text{по } \mathcal{E}} \delta(\mathcal{E} - E) \int_{G_{\mathcal{E}}} dqdp = c\Omega(E) = 1. \end{aligned}$$

Звідси

$$C = \frac{1}{\Omega(E)}. \quad (10.12)$$

Отже, константа нормування C мікроканонічного розподілу знаходиться за формулою (10.12).

§11. Квазінезалежні системи. Канонічний розподіл Гіббса

В попередньому параграфі ми розглянули статистичний ансамбль статистичних систем і отримали функцію розподілу - мікроканонічний розподіл. Але ізольована система є певною ідеалізацією, тому розглянемо зараз статистичний ансамбль систем, що можуть обмінюватись енергією (рис. 14).

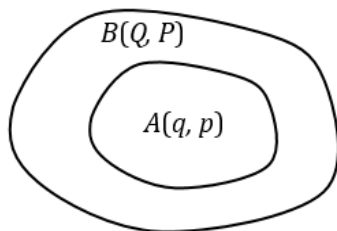


Рис. 14

Розглянемо систему A , що оточена системою B набагато більших розмірів. Узагальнені координати та узагальнені імпульси частинок системи A будемо описувати координатами (q, p) , а

узагальнені координати та узагальнені імпульси частинок системи B будемо описувати (Q, P) . Причому теплоємність системи B настільки велика, що коли з якихось причин в системі A виділяється певна кількість теплоти, то система B миттєво поглинає її, причому температура системи B практично не змінюється. Систему B називають *термостатом*, систему A *системою в термостаті*. Ми розглядаємо систему A і термостат B як деяку велику систему і будемо вважати її ізольованою.

З сказаного зрозуміло, що між ними є ідеальна теплова рівновага. Система в термостаті на відміну від ізольованої системи є більш реальною, тому що враховує обмін енергією між системами. Хоча це все робиться з деякими умовностями (наприклад, елемент живлення і ліхтарик, конденсатор).

Статистичний ансамбль систем, що перебувають в термостатах називаються *канонічним ансамблем Гіббса*. Зауважимо, що найсерйозніша ідеалізація полягає в тому, що система і термостат обмінюються *тільки енергією, а не частинками*.

Статистичний ансамбль, що обмінюється не тільки енергією, але й частинками називається *великим канонічним ансамблем Гіббса*.

Знайдемо функцію розподілу для канонічного ансамблю Гіббса. Для цього спочатку введемо поняття квазінезалежних систем («квазі» - майже).

Розглянемо повну енергію системи в термостаті і термостата

$$H(q, p, Q, P) = H_c(q, p) + H_T(Q, P) + U_{B3}(q, p, Q, P), \quad (11.1)$$

де $H_c(q, p)$ - функція Гамільтона системи; $H_T(Q, P)$ - функція Гамільтона термостата; $U_{B3}(q, p, Q, P)$ - енергія взаємодії системи і термостата.

Нехай N_c, N_T - число частинок в системі та в термостаті відповідно. Тоді $N = N_c + N_T$ - число частинок великої системи. Оскільки взаємодія між системою і термостатом відбувається через поверхню їх розділу, то через малий радіус дії міжмолекулярних сил r_0 , число частинок термостата N_{B3} , що взаємодіють з частинками системи в термостаті, є досить малим (це число порядку числа частинок в шарі, товщина якого за порядком величини приблизно дорівнює радіусу міжмолекулярної взаємодії $r_0 \sim 10^{-9}$ м). Тому для макроскопічної системи справедливими будуть такі співвідношення:

$$N_{B3} \ll N_c, N_{B3} \ll N_T.$$

Але $H_c \sim N_c$, $H_T \sim N_T$, $U_{B3} \sim N_{B3}$, тому що енергія - величина адитивна, а значить пропорційна числу частинок. Отже, з

урахуванням попередніх нерівностей, можна записати:

$$U_{\text{вз}} \ll H_{\text{с}}; U_{\text{вз}} \ll H_{\text{т}}. \quad (11.2)$$

Таким чином, з отриманих нерівностей бачимо, що енергію взаємодії $U_{\text{вз}}$ в балансі енергій можна знехтувати. Це означає, що енергією взаємодії $U_{\text{вз}}$ можна відкинути із-за малості. У цьому випадку треба пам'ятати, що тільки завдяки взаємодії реалізується теплова рівновага між системою і термостатом. Отже, вираз (11.1) набуває вигляду:

$$H(q, p, Q, P) = H_{\text{с}}(q, p) + H_{\text{т}}(Q, P). \quad (11.3)$$

Такі системи для яких в балансі енергій можна знехтувати енергією взаємодії, перейшовши від співвідношення (11.1) до співвідношення (11.3) називаються *квазінезалежними системами*.

Отже, систему в термостаті можна вважати квазінезалежною і для неї можна отримати функцію розподілу. Точний метод знаходження функції розподілу для системи в термостаті такий: треба записати функції розподілу для системи і термостата як цілого, це буде мікроканонічний розподіл, а далі проінтегрувати за координатами в термостатах, отримана функція розподілу буде залежати тільки від координат (q, p) системи і отже, буде функцією розподілу системи в термостаті (див. Л.В. Черниш «Основи статистичної фізики і термодинаміки», с. 52-58).

Зараз ми отримаємо функції розподілу більш грубим методом. Для системи в термостаті можна записати:

$$\ln \rho(q, p) = \alpha + \beta H(q, p). \quad (11.4)$$

Проекспоненціюємо цю функцію розподілу:

$$\rho(q, p) = e^{\alpha} e^{\beta H(q, p)}. \quad (11.5)$$

Введемо позначення:

$$e^{\alpha} = \frac{1}{Z}, \quad (11.6)$$

де Z - це статистичний інтеграл системи.

Тоді вираз (11.5) має вигляд:

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{\beta H(q, p)}. \quad (11.7)$$

Запишемо умову нормування:

$$\frac{1}{Z} \int e^{\beta H(q, p)} dq dp = 1. \quad (11.8)$$

Для того, щоб інтеграл у формулі (11.8) був збіжним, необхідно, щоб $\beta < 0$ (рис. 15).

Введемо позначення:

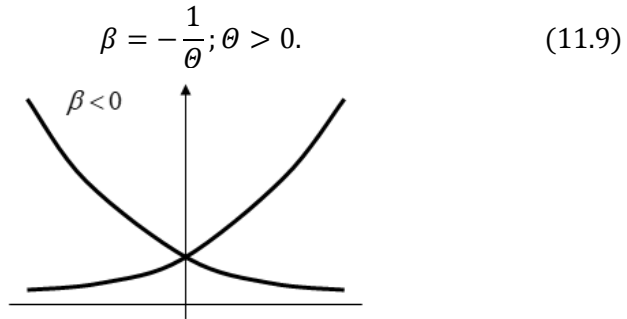


Рис. 15

Величина θ називається *модулем канонічного розподілу*

$$\theta = kT, \quad (11.10)$$

де T - абсолютна температура; k - стала Больцмана.

Отже, функція розподілу для системи в термостаті набуває вигляду:

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}}. \quad (11.11)$$

Фізичний зміст функції $\rho(q, p)$ (канонічний розподіл Гіббса) такий:

1. Функція розподілу $\rho(q, p)$ задає густину ймовірності того, що фазова точка в термостаті має координати, що лежать в межах $[q, q + dq]; [p, p + dp]$.

2. Задає густину ймовірності того, що фазова точка системи лежить в околі q, p .

3. Функція розподілу задає густину ймовірності того, що серед систем канонічного ансамблю є система, фазова точка якої лежить в околі q, p .

4. Задає густину ймовірності того, що координати та проекції імпульсів кожної частинки системи в термостаті лежать в певних межах:

$$\begin{aligned} & [x_1, x_1 + dx_1][x_2, x_2 + dx_2] \dots [x_N, x_N + dx_N] \\ & [y_1, y_1 + dy_1][y_2, y_2 + dy_2] \dots [y_N, y_N + dy_N]; \\ & [z_1, z_1 + dz_1][z_2, z_2 + dz_2] \dots [z_N, z_N + dz_N] \\ & [p_{1x}, p_{1x} + dp_{1x}][p_{2x}, p_{2x} + dp_{2x}] \dots [p_{Nx}, p_{Nx} + dp_{Nx}] \\ & [p_{1y}, p_{1y} + dp_{1y}][p_{2y}, p_{2y} + dp_{2y}] \dots [p_{Ny}, p_{Ny} + dp_{Ny}] \\ & [p_{1z}, p_{1z} + dp_{1z}][p_{2z}, p_{2z} + dp_{2z}] \dots [p_{Nz}, p_{Nz} + dp_{Nz}] \end{aligned} \quad (11.12)$$

Щоб з'ясувати вигляд статистичного інтегралу Z , напишемо умову нормування канонічного розподілу Гіббса (11.11):

$$\frac{1}{Z} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp = 1. \quad (11.13)$$

Звідси

$$Z = \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp. \quad (11.14)$$

Вираз (11.14) - функція, до якої входить повна енергія системи інтегрування за координатами і проєкціями імпульсу всіх частинок і тому зрозуміло, що Z несе інформацію про всю систему, з чим і пов'язана його назва - *статистичний інтеграл системи*.

Запишемо середнє значення для будь якої фізичної величини за канонічним ансамблем Гіббса:

$$\bar{L} = \frac{1}{Z} \int L(q,p) e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp. \quad (11.15)$$

Як ми покажемо пізніше, знаючи Z можна обчислити будь яку характеристику системи (наприклад, внутрішню енергію, сумарний магнітний момент).

§12. Аналіз канонічного розподілу Гіббса

Ми вияснили, що функція розподілу визначається тільки повною енергією системи, тобто

$$\rho(q,p) = \rho(H(q,p)).$$

Якщо в даному мікростані

$$H(q,p) = \mathcal{E}_1,$$

то можна записати:

$$\rho(q,p) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{E}_1}{\theta}}.$$

Тоді ймовірність перебування фазової точки в околі цього мікростану можна записати:

$$dW_1 = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{\mathcal{E}_1}{\theta}} d\Gamma_1. \quad (12.1)$$

Якщо в якомусь іншому мікростані

$$H(q,p) = \mathcal{E}_2,$$

то ймовірність попадання в окіл цього мікростану буде:

$$dW_2 = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{\mathcal{E}_2}{\theta}} d\Gamma_2. \quad (12.2)$$

Графічно відтворити можна так як показано на рисунку 16.

Із співставлення ймовірностей (12.1) та (12.2) можна зробити

висновок, що чим меншою буде енергія $\mathcal{E}$, тим більшою буде попадання фазової точки в окіл мікростану з цією енергією. Максимальну ймовірність будуть мати мікростани, в яких енергія рівна нулю.

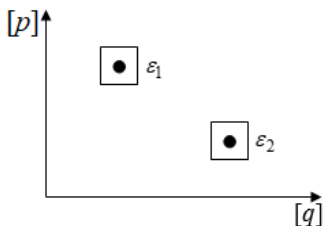


Рис. 16

Справа в тому, що ймовірність попадання фазової точки в окіл певного мікростану і ймовірність реалізації певного значення енергії системи це різні речі.

Знайдемо тепер ймовірність того, що енергія системи набуває певного значення $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$. Для цього виділимо в фазовому просторі область де лежать всі мікростани, що реалізують значення енергії в межах $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$. Зробимо рисунок (див. рис. 17).

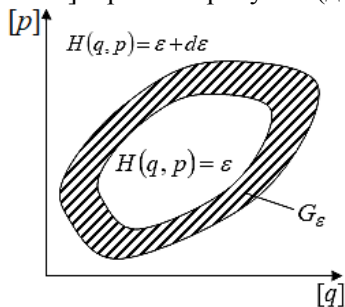


Рис. 17

Позначимо цю область $G_\mathcal{E}$. За попадання в область $G_\mathcal{E}$ фазової точки енергія системи буде лежати в межах $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$. Отже, для знаходження шуканої ймовірності, необхідно знайти ймовірність попадання фазової точки в область $G_\mathcal{E}$. Ця ймовірність запишеться так:

$$dW(\mathcal{E}) = \frac{1}{Z} \int_{G_\mathcal{E}} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{E}}{\theta}} \int_{G_\mathcal{E}} dqdp = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{E}}{\theta}} \Omega(\mathcal{E}) d\mathcal{E}. \quad (12.3)$$

У виразі (12.3) використана заміна

$$\int_{G_{\mathcal{E}}} dqdp = \Omega(\mathcal{E}) d\mathcal{E}.$$

Вираз (12.3) дає нам шукану ймовірність, але залежить він не тільки від $\mathcal{E}$, а й від числа мікростанів, що реалізують це значення енергії. Отримаємо тепер, виходячи з (12.3) функцію розподілу за енергією для системи в термостаті (або для ансамблю систем в термостаті)

$$\rho(\mathcal{E}) = \frac{dW}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{E}}{\theta}} \Omega(\mathcal{E}), \quad (12.4)$$

де dW - це не похідна.

Дуже важливо, що функція розподілу за енергією залежить від енергії й від числа мікростанів, які ці значення енергії реалізують, так що $\rho(\mathcal{E})$ приймає максимальне значення поблизу значення $\mathcal{E} = \overline{H(q,p)}$.

Покажемо, що $\overline{H(q,p)} = \bar{\mathcal{E}}$. Інтегрування проведемо в два етапи за $\mathcal{E}$ та $G_{\mathcal{E}}$:

$$\begin{aligned} \overline{H(q,p)} &= \frac{1}{Z} \int H(q,p) e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp = \\ &= \frac{1}{Z} \int_{\text{по } \mathcal{E}} \int_{G_{\mathcal{E}}} H(q,p) e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp = \frac{1}{Z} \int_{\text{по } \mathcal{E}} \mathcal{E} e^{-\frac{\mathcal{E}}{\theta}} \int_{G_{\mathcal{E}}} dqdp = \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \mathcal{E} e^{-\frac{\mathcal{E}}{\theta}} \Omega(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \bar{\mathcal{E}}. \end{aligned} \quad (12.5)$$

Таким чином, ми довели, що середнє значення функції Гамільтона $\overline{H(q,p)}$ дорівнює середньому значенню енергії $\bar{\mathcal{E}}$.

§13. Великий канонічний розподіл Гіббса

Розглянемо статистичний ансамбль систем, що взаємодіють з термостатами обмінюючись енергією і частинками. Через те, що дуже часто число частинок системи є змінним параметром і тому саме така ситуація є найбільш фізично реальною. Тобто, у цих випадках мають справу з *системою із змінним числом частинок*. Щоб задати мікростан такої системи, треба вказати не тільки координати та проекції імпульсів всіх частинок системи (q,p) а і число частинок N . Функція розподілу для такого ансамблю має вигляд:

$$\rho_N(q, p) = C \cdot e^{\frac{\mu N - H_N(q, p)}{\theta}}, \quad (13.1)$$

де C - константа; N - повне число частинок (змінне), що є в системі; $H_N(q, p)$ - повна енергія, коли в ній N частинок; μ - хімічний потенціал системи.

Тоді цей великий розподіл Гіббса (13.1) задає густину ймовірності того, що серед систем великого канонічного ансамблю є система, число частинок в якій N і її фазова точка лежить в околі точки з координатами (q, p) .

Якщо замість константи нормування C ввести деяку іншу постійну величину Ω , згідно із співвідношенням:

$$C = e^{\frac{\Omega}{\theta}}.$$

Тому для великого канонічного розподілу Гіббса маємо такий вираз:

$$\rho_N(q, p) = C \cdot e^{\frac{\Omega + \mu N - H_N(q, p)}{\theta}}. \quad (13.2)$$

Умова нормування великого канонічного розподілу Гіббса буде мати такий вигляд:

$$C \sum_{N=0}^{\infty} e^{\frac{\mu N - H_N(q, p)}{\theta}} dq dp = 1. \quad (13.3)$$

Середнє значення фізичної величини за великим канонічним розподілом Гіббса буде мати вигляд:

$$\bar{L} = C \sum_{N=0}^{\infty} \int L_N(q, p) e^{\frac{\mu N - H_N(q, p)}{\theta}} dq dp. \quad (13.4)$$

У цьому виразі $L_N(q, p)$ - значення фізичної величини в мікростані, що характеризується числом частинок N і узагальненими координатами та імпульсами всіх частинок (q, p) .

Середнє значення, що обчислене за формулою (13.4) називається *середнім за великим канонічним ансамблем*. Формулу для середнього за великим канонічним ансамблем можна записати ще у такому вигляді:

$$\bar{L} = C \sum_{N=0}^{\infty} \int L_N(q, p) e^{\frac{\mu N - H_N(q, p)}{\theta}} d\Gamma_N. \quad (13.5)$$

Отже, вираз (13.5) дає можливість обчислити середнє число частинок в системі.

Лекція 4. ДЕЯКІ СПІВВІДНОШЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ

§14. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга і квантування фазового простору.

§15. Канонічний розподіл Гіббса в квантовій статистиці.

§16. Врахування квантової нерозпізнаності мікрочастинок.

[6. §13-§15; 7. §35; 8. §II.11]

§14. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга і квантування фазового простору

У класичній статистичній фізиці мікростан системи визначається з допомогою координат та проекцій імпульсів всіх частинок системи:

$$\begin{cases} q_1, q_2, \dots, q_s; \\ p_1, p_2, \dots, p_s. \end{cases} \quad (14.1)$$

Але з квантової механіки відомо, що не можна одночасно визначити абсолютно точно однойменні координати та проекції імпульсів частинки. Наприклад, q_i та p_i (або x_i та p_{ix}). Оскільки для цих величин існує *співвідношення невизначеностей Гейзенберга*.

Якщо позначити через Δq_i - невизначеність узагальненої координати q_i , а через Δp_i - невизначеність узагальненого імпульсу p_i , то співвідношення Гейзенберга матиме вигляд:

$$\Delta q_i \cdot \Delta p_i \geq h, \quad (14.2)$$

де $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - стала Планка.

Зазначимо, що це співвідношення справедливе для кожної пари канонічно спряжених координат та імпульсів. Нагадаємо, що це співвідношення є результатом корпускулярно-хвильового дуалізму матерії, і воно свідчить про неможливість застосування всіх класичних понять до мікросвіту.

Позначимо через Δq_i^0 та Δp_i^0 найменші невизначеності координат та імпульсів, за яких ще виконується співвідношення (14.2). Очевидно, що вони будуть задовольняти співвідношення:

$$\Delta q_i^0 \cdot \Delta p_i^0 = h. \quad (14.3)$$

Зрозуміло, що величини Δq_i^0 та Δp_i^0 задають максимальну точність, з якою можна визначити координати та імпульси q_i, p_i .

Розглянемо елемент об'єму фазового простору $\Delta \Gamma_0$:

$$\Delta \Gamma_0 = \Delta q_1^0 \cdot \Delta q_2^0 \cdot \dots \cdot \Delta q_s^0 \cdot \Delta p_1^0 \cdot \Delta p_2^0 \cdot \dots \cdot \Delta p_s^0. \quad (14.4)$$

Використовуючи формулу (14.3), цей елемент об'єму можна переписати у вигляді:

$$\Delta\Gamma_0 = \prod_{i=1}^s \Delta q_i^0 \cdot \Delta p_i^0 = h^s. \quad (14.5)$$

У $2s$ -мірному фазовому Γ -просторі даний елемент об'єму буде $2s$ -мірним паралелепіпедом. Схематично цей об'єм можна зобразити на площині (q, p) у вигляді прямокутника.

Якщо дві довільні фазові точки потрапляють в цей об'єм фазового простору, то різниця між її узагальненими координатами Δq_i буде менша, ніж Δq_i^0 , а різниця між їх узагальненими імпульсами Δp_i буде менша, ніж Δp_i^0 . Отже, ніяким способом, навіть в принципі, не можна розрізнити мікростани, які відповідають положенням цих фазових точок, що потрапили в елемент об'єму фазового простору $\Delta\Gamma_0$. Таким чином, всі фазові точки, що потрапляють в елемент об'єму фазового простору $\Delta\Gamma_0 = h^s$, відповідають одному і тому ж мікростану (оскільки немає можливості розрізнити ці мікростани). Інакше кажучи, на один мікростан в фазовому Γ -просторі припадає об'єм Γ -простору, величиною h^s ; кожна така комірка (яку можна назвати квантом фазового простору) відповідає одному мікростану системи. Отже, можна сказати, що фазовий Γ -простір квантується і величина кванта Γ -простору рівна h^s .

На рисунку 18 показано розбиття (квантування) фазового простору на комірки (кванти), величиною h^s .

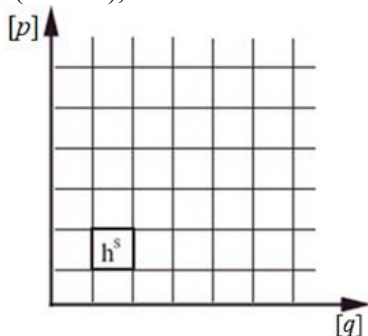


Рис. 18

Таким чином, з введенням поняття квантування фазового простору можна стверджувати, що всі можливі мікростани системи утворюють зчисленну, хоча і безмежну множину, так що всі

мікростани системи можна певним чином перенумерувати. Отже, той чи інший можливий мікростан системи є *дискретною випадковою величиною*. Тому будемо говорити, що система знаходиться в мікростані з номером n , якщо її фазова точка потрапляє в комірку з цим же номером. Отже, можна говорити про ймовірність W_n того, що система знаходиться в даному мікростані.

Зауваження: в рамках класичної статистичної фізики був зміст говорити лише про ймовірність попадання фазової точки в окіл даного мікростану, а з урахуванням квантування фазового простору, коли кожний мікростан є дискретною випадковою величиною, можна говорити про попадання фазової точки безпосередньо в даний мікростан.

§15. Канонічний розподіл Гіббса в квантовій статистиці

Згадаємо деякі співвідношення із класичної статистики:

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp. \quad (15.1)$$

Якщо позначити через E_n значення функції Гамільтона, яке вона набуває, коли фазова точка знаходиться в мікростані з номером n фазового простору, то ймовірність попадання фазової точки системи в термостаті в цей n -тий мікростан можна записати у вигляді:

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{\theta}} dqdp. \quad (15.2)$$

Врахувавши, що $dq \cdot dp = h^s$, можна записати:

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{\theta}} h^s. \quad (15.3)$$

Оскільки статистичний інтеграл має вигляд:

$$Z = \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp, \quad (15.4)$$

то перепишемо вираз (15.3) у вигляді:

$$W_n = \frac{h^s}{\int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp} \cdot e^{-\frac{E_n}{\theta}}. \quad (15.5)$$

Тепер статистичний інтеграл визначимо дещо інакше:

$$Z_1 = \frac{Z}{h^s} = \frac{1}{h^s} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dqdp. \quad (15.6)$$

Вираз (15.6) дає правило обчислення статистичного інтеграла з урахуванням квантування фазового простору.

Перейдемо у виразі (15.6) від інтеграла до суми, врахувавши, що прямування елемента об'єму фазового простору $\Delta\Gamma_n$ до нуля з фізичної точки зору еквівалентне тому, що цей об'єм прямуватиме до h^s , тобто $\Delta\Gamma_n \rightarrow h^s$:

$$Z_1 = \lim_{\Delta\Gamma_n \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \cdot \frac{\Delta\Gamma_n}{h^s} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \cdot \frac{h^s}{h^s}. \quad (15.7)$$

Отже,

$$Z_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \equiv Z_{\text{КВ}}. \quad (15.8)$$

Величину $Z_{\text{КВ}}$ називають *квантовою статистичною сумою* або просто *статистичною сумою*. Вона є квантовим аналогом статистичного інтеграла (15.6) і враховує всі квантові закономірності в системі.

З урахуванням означення (15.8) *квантовий канонічний розподіл Гіббса* можна записати у вигляді:

$$W_n = \frac{1}{Z_{\text{КВ}}} e^{-\frac{E_n}{\theta}}. \quad (15.9)$$

Фізичний зміст квантового канонічного розподілу Гіббса (15.9) полягає в тому, що він задає *ймовірність попадання фазової точки системи в термостаті в будь-який мікростан з енергією E_n* .

Можна показати, що з врахуванням квантування фазового простору середнє значення довільної фізичної величини буде обчислюватись за формулою:

$$\bar{L} = \frac{1}{Z} \int L(q, p) e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}. \quad (15.10)$$

Інакше кажучи, під час розрахунків необхідно формально замінити $dq dp$ на $\frac{dq dp}{h^s}$.

§16. Врахування квантової нерозпізнаності мікрочастинок

Покажемо, як можна врахувати *квантову нерозпізнаність* мікрочастинок для розрахунку статистичного інтеграла та середнього значення довільної фізичної величини.

Розглянемо (див. рис. 19) для простоти систему з 3-х частинок і

зафіксуємо три певних мікростани, які відрізняються один від одного перестановкою частинок, де стрілками схематично позначено імпульси кожної частинки.

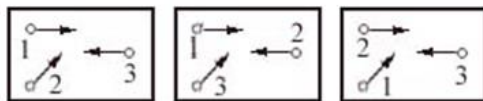


Рис. 19

З точки зору класичної статистичної фізики всі ці мікростани - різні, оскільки заміна місцями класичних частинок є фізичним процесом, який можна зафіксувати. Якщо ж врахувати принцип квантової нерозпізнаності (квантової тотожності) мікрочастинок, коли ніяким способом, навіть в принципі, не можна розрізнити між собою квантові мікрочастинки одного сорту (тобто, ніяким способом не можна зафіксувати заміни місцями квантових частинок, оскільки це не є фізичним процесом), то всі ці мікростани будуть відповідати *одному мікростану системи*. Отже, для системи, що містить N частинок, є $N!$ (« $N!$ » - читається як N факторіал) різних їх перестановок, що відповідатимуть одному і тому ж мікростану системи. Тому у розрахунках статистичного інтегралу необхідно ввести множник $\frac{1}{N!}$ щоб не враховувати один і той самий мікростан $N!$ разів. Отже, статистичний інтеграл набуде вигляду:

$$Z = \frac{1}{N! h^s} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dq dp. \quad (16.1)$$

Вираз (16.1) дає *статистичний інтеграл в квазікласичному наближенні (коли враховано квантування фазового простору та принцип квантової нерозпізнаності мікрочастинок)*.

Аналогічно середнє значення фізичної величини $\bar{L}$ з урахуванням квантування фазового простору та принципу квантової нерозпізнаності мікрочастинок необхідно записувати у вигляді:

$$\bar{L} = \frac{1}{ZN!} \int L(q,p) e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}. \quad (16.2)$$

З виразу (16.2) видно, що можна знайти середнє значення фізичної величини $\bar{L}$ з урахуванням квантування фазового простору та принципу квантової нерозпізнаності мікрочастинок.

Лекція 5. ЗВ'ЯЗОК СТАТИСТИКИ З ТЕРМОДИНАМІКОЮ

§17. Статистичне означення ентропії системи.

§18. Поняття вільної енергії системи.

§19. Основне рівняння рівноважної статистичної термодинаміки (перший закон термодинаміки) як наслідок канонічного розподілу.

[1. §4.4; 2. §1.9, §1.10, §3.2; 3. §3; 4. §1, §2; 6. §16-§18; 7. §9, §25; 8. §II.12, §III.1]

§17. Статистичне означення ентропії системи

Розглянемо ізольовану систему, що перебуває в стані термодинамічної рівноваги. Як відомо, що ізольована система і система в термостаті практично весь час набувають таких значень енергії, які мало відрізняються від середніх. Оскільки відносні флуктуації енергії (тобто відносні відхилення енергії від середнього значення) дуже малі. Причому $\frac{\Delta E}{\bar{E}}$, відносне відхилення енергії буде порядку $\frac{1}{\sqrt{N}}$ в стані термодинамічної рівноваги, тобто:

$$D_\epsilon = \frac{\sqrt{(E - \bar{E})^2}}{\bar{E}} \sim \frac{\Delta E}{\bar{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (17.1)$$

то це означає, що фазова точка цієї системи практично весь час перебуває в області тих мікростанів, де її повна енергія дорівнює середньому значенню функції Гамільтона (див. рис. 20).

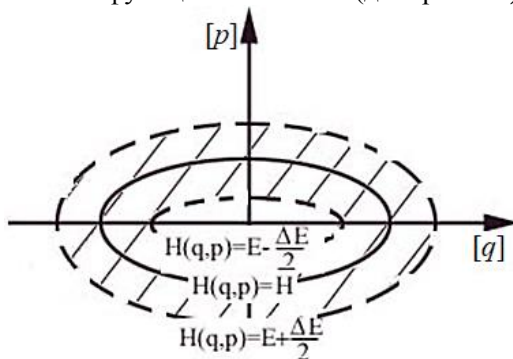


Рис. 20

Щоб визначити величину об'єму фазового простору цієї області, введемо величину $\Delta\Gamma$, яку визначимо таким співвідношенням:

$$\frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{\bar{H}}{\theta}} \cdot \frac{\Delta\Gamma}{h^s} = 1, \quad (17.2)$$

де $\bar{H}$ - середнє значення функції Гамільтона.

Нехай об'єм цієї заштрихованої області $\Delta\Gamma$. Тоді фізичний зміст об'єму фазового простору $\Delta\Gamma$ полягає в тому, що $\Delta\Gamma$ чисельно дорівнює об'єму тієї частини фазового простору, де практично весь час перебуває фазова точка квазіізовованої системи в рівноважному стані. Тоді можна визначити число мікростанів в цьому об'ємі:

$$W = \frac{\Delta\Gamma}{h^s}. \quad (17.3)$$

Область $\Delta\Gamma$ - це та область, де постійно буде перебувати фазова точка (рис. 21). Практично всі ці W мікростанів реалізують стан термодинамічної рівноваги ізовованої системи.

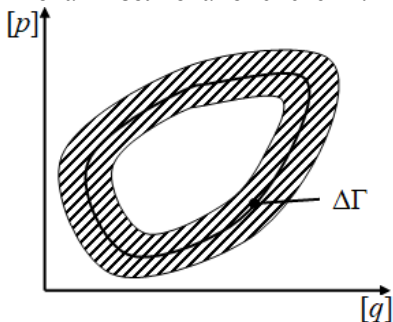


Рис. 21

Введемо величину

$$S = k \ln W, \quad (17.4)$$

де $k = 1,38 \cdot 10^{23}$ Дж/К - стала Больцмана.

Величина S називається *ентропією системи* і є одним з найбільш фундаментальних понять сучасної науки.

Тобто, *ентропія ізовованої системи в стані термодинамічної рівноваги визначається логарифмом числа мікростанів, що реалізують даний рівноважний стан*. Отже, за означенням, ентропія системи визначається логарифмом числа мікростанів, що реалізують стан термодинамічної рівноваги.

Важливо відзначити, що строге визначення поняття ентропії

можна ввести лише для ізольованої макроскопічної системи, що перебуває в стані термодинамічної рівноваги. Таким чином, поняття ентропії є виключно *статистичним поняттям, тобто таким, яке можна застосовувати лише для системи, що складається з дуже великого числа частинок.*

Оскільки число можливих рівноважних мікростанів W завжди більше одиниці, то і ентропія системи теж завжди додатна. Тобто число мікростанів $W \geq 1$, то ентропія завжди $S \geq 0$.

Ентропія є надзвичайно важливою характеристикою системи і це поняття застосовують не тільки у фізиці, а у багатьох інших науках.

Ентропія - це величина, яка характеризує *ступінь хаосу* в системі. Оскільки із усіх станів стан термодинамічної рівноваги реалізується найбільшим числом мікростанів, то ентропія буде максимальною саме в стані термодинамічної рівноваги. Величину $W = \frac{\Delta\Gamma}{h^s}$ інколи називають *термодинамічною ймовірністю стану термодинамічної рівноваги*. (Не плутати з математичною ймовірністю, яка змінюється від 0 до 1, а термодинамічна ймовірність стану термодинамічної рівноваги змінюється від 1 до ∞).

§18. Поняття вільної енергії системи

В статистичній термодинаміці, зручно замість статистичного інтегралу Z ввести іншу величину, яку визначають таким співвідношенням:

$$\frac{1}{Z} = e^{\frac{F}{\theta}}. \quad (18.1)$$

Звідки

$$\begin{aligned} \ln \frac{1}{Z} &= \frac{F}{\theta}, \\ F &= \theta \ln \frac{1}{Z}, \\ F &= -\theta \ln Z, \end{aligned} \quad (18.2)$$

де F - величина, що називається *вільною енергією системи*.

Співвідношення (18.2) є надзвичайно важливим, оскільки дає можливість обчислити термодинамічний параметр системи, виходячи безпосередньо з теоретичних міркувань і порівняти його з експериментальними результатами.

Отже, маючи вираз для статистичного інтегралу, легко обчислити вільну енергію системи, яка є важливою термодинамічною

характеристикою системи. З урахуванням цього канонічний розподіл Гіббса

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}}$$

набуває вигляду:

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{F - H(q, p)}{\theta}}. \quad (18.3)$$

Маючи вираз для вільної енергії системи, легко можна обчислити ентропію системи згідно співвідношення:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \quad (18.4)$$

Можна знайти й інші співвідношення, які пов'язують вільну енергію системи з різними термодинамічними функціями, в тому числі і такими, значення яких в певних умовах можна отримати експериментально.

Приклад. Отримати вираз, який пов'язує вільну енергію системи F з її внутрішньою енергією U та ентропією S .

Скористаємось співвідношенням:

$$S = -k \overline{\ln \rho(q, p)}. \quad (18.5)$$

Тоді з (18.3) знаходимо:

$$\ln \rho(q, p) = \frac{F - H(q, p)}{\theta}. \quad (18.6)$$

Після усереднення виразу (18.6) отримуємо для ентропії таке співвідношення:

$$S = -\frac{\overline{F - H(q, p)}}{T} = \frac{\overline{H} - F}{T}. \quad (18.7)$$

З урахуванням того, що $\overline{H}$ за означенням дорівнює внутрішній енергії U , остаточно маємо:

$$S = \frac{U - F}{T}. \quad (18.8)$$

Формулою (18.8) ми будемо часто користуватися у наступних лекціях.

§19. Основне рівняння рівноважної статистичної термодинаміки (перший закон термодинаміки) як наслідок канонічного розподілу

Статистична термодинаміка - це розділ статистичної фізики, основним завданням якого є обґрунтування законів термодинаміки з

допомогою основних принципів статистичної фізики.

З макроскопічної точки зору стан системи задається сукупністю макроскопічних параметрів, які характеризують систему в цілому (наприклад, тиск, внутрішня енергія тощо). Макроскопічні параметри в стані термодинамічної рівноваги називають *рівноважними термодинамічними параметрами*.

Статистична термодинаміка базується на опису властивостей макросистеми, причому мікроструктура системи буде врахована в усіх процесах за рахунок канонічного розподілу Гіббса. У цьому випадку термодинамічні параметри системи будуть розраховуватись як середні значення відповідних їм мікроскопічних величин.

Наприклад, нехай в мікростані (q, p) фізична величина, що характеризує систему, має значення $L(q, p)$. Тоді відповідний термодинамічний параметр буде являти собою величину $\bar{L}$, отже, буде записуватись у вигляді:

$$\bar{L} = \int L(q, p) \rho(q, p) \frac{dq dp}{h^s}. \quad (19.1)$$

Якщо врахувати який вигляд функції розподілу - канонічного розподілу Гіббса з врахуванням квантування фазового простору і квантової нерозпізнаності мікрочастинок, то термодинамічний параметр $\bar{L}$ буде обчислюватись згідно з виразом:

$$\bar{L} = \frac{1}{ZN!} \int L(q, p) e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s} = \frac{1}{N!} \int L(q, p) e^{-\frac{F-H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}, \quad (19.2)$$

де $\rho(q, p) = \frac{1}{ZN!} e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}}$; $\frac{1}{Z} = e^{\frac{F}{\theta}}$.

Ось таким способом статистична фізика забезпечує можливість обчислювати термодинамічні параметри і дає обґрунтування законам термодинаміки.

Оскільки внутрішня енергія, як термодинамічний параметр системи являє собою середнє значення функції розподілу, взяте за канонічним ансамблем Гіббса, то запишемо відповідний вираз:

$$\begin{aligned} U = \overline{H(q, p)} &= \frac{1}{ZN!} \int H(q, p) e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s} = \\ &= \frac{1}{N!} \int H(q, p) e^{-\frac{F-H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}, \end{aligned} \quad (19.3)$$

де $\rho(q, p) = e^{\frac{F-H(q, p)}{\theta}}$.

Таким чином, в основу статистичної термодинаміки покладено цілком природнє твердження про те, що *внутрішня енергія*

макроскопічної системи тотожна з середньою енергією $\bar{\epsilon}$, яка обчислена за законами статистичної фізики.

Оскільки в системі, що містить макроскопічно велике число частинок, що знаходяться в стані термодинамічної рівноваги, середня енергія $\bar{\epsilon}$ практично точно збігається з найбільш ймовірним значенням енергії. Це твердження можна сформулювати інакше: *внутрішня енергія будь-якої макроскопічної системи являє собою енергію теплового руху та взаємодії молекул, з яких побудована дана система.* Саме це твердження є основою для подальшого розгляду законів термодинаміки, і, виходячи з нього, можна отримати вирази для всіх основних законів термодинаміки.

Лекція 6. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ПАРАМЕТРИ ТА ЇХ ЗВ'ЯЗКИ

§20. Зв'язок термодинамічних параметрів із зовнішніми параметрами системи. Узагальнена сила.

§21. Зв'язок термодинамічних параметрів з вільною енергією системи. (Формула Гіббса-Гемгольца).

[1. §2.1; 4. §5, §26; 5. §4.1, §4.5, §4.7; 6. §10, §19; 7. §5; 8. §III.1]

§20. Зв'язок термодинамічних параметрів із зовнішніми параметрами системи. Узагальнена сила

Проаналізуємо тепер питання про те, від чого ж залежать термодинамічні параметри. Розглянемо функцію Гамільтона системи. Вона залежить не тільки від координат та проекцій імпульсів всіх частинок системи q та p , а також і від зовнішніх параметрів системи, всю сукупність яких ми позначимо однією літерою a , тобто

$$H = H(q, p, a). \quad (20.1)$$

Нагадаємо, що *зовнішніми параметрами системи* називаються такі її параметри, які характеризуються розміщенням і рухом частинок, котрі не належать до системи, яка досліджується. Зауважимо, що функція Гамільтона H від всіх зовнішніх параметрів залежить *параметрично*. Взагалі кажучи, для довільної фізичної величини L таку залежність за аналогією можна записати у вигляді:

$$L = L(q, p, a). \quad (20.2)$$

Якщо врахувати таку залежність фізичних величин від зовнішніх

параметрів, то і для їх середніх значень (тобто для термодинамічних параметрів) теж отримаємо залежність від сукупності зовнішніх параметрів a (а також і від величин θ , N , тощо, N - число частинок системи):

$$\bar{L} = \bar{L}(\theta, a, N). \quad (20.3)$$

Простою будемо називати таку термодинамічну систему, для якої зовнішній параметр a збігається з об'ємом V . Тоді для такої системи залежність (20.3) буде мати вигляд:

$$\bar{L} = \bar{L}(\theta, V, N). \quad (20.4)$$

Як бачимо, статистична фізика дає можливість теоретично розрахувати термодинамічні параметри і знайти їх залежність від температури та зовнішніх параметрів системи. Наприклад, внутрішня енергія системи може бути розрахована за формулою:

$$U \equiv U(\theta, a) = \bar{H} = \frac{1}{N!} \int H(q, p, a) e^{\frac{F-H(q,p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}. \quad (20.5)$$

Розглянемо, як буде змінюватись тепер функція Гамільтона системи за зміни зовнішніх параметрів. Нехай система перебуває у мікростані (q, p) , і деякий i -тий зовнішній параметр a_i змінюється на величину da_i . Тоді відповідна зміна функції Гамільтона буде така:

$$d_i H = \frac{\partial H}{\partial a_i} da_i. \quad (20.6)$$

Індекс i біля знаку диференціала показує, що саме та зміна функції Гамільтона, що пов'язана із зміною зовнішнього параметра da_i . Зміна внутрішньої енергії $d_i U$ у відповідності з (20.5) буде описуватись виразом

$$d_i U = \overline{d_i H} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial a_i} da_i. \quad (20.7)$$

З іншого боку, зміна зовнішнього параметра a_i на величину da_i пов'язується з деякою роботою $\delta_i W$, причому

$$\delta_i W \sim da_i. \quad (20.8)$$

Перейдемо в цьому виразі до рівності:

$$\delta_i W = A_i da_i. \quad (20.9)$$

Нагадаємо, що в механіці робота визначається співвідношенням

$$\delta W = (\vec{F} \cdot d\vec{r}), \quad (20.10)$$

де $\vec{F}$ - сила, що діє на тіло, $d\vec{r}$ - переміщення тіла.

За аналогією з формулою (20.10) коефіцієнт пропорційності відповідає узагальненому переміщенню da_i . Зауважимо, що кожному

зовнішньому параметру відповідає своя узагальнена сила.

За законом збереження енергії зміна внутрішньої енергії системи у цьому випадку дорівнює роботі $\delta_i W$, яку виконала система:

$$d_i U = -\delta_i W, \quad (20.11)$$

де знак «мінус» відповідає такій ситуації, коли система виконує роботу за рахунок зменшення своєї внутрішньої енергії, тобто робота виконується за рахунок системи.

Підставляючи у (20.11) вирази (20.7) і (20.9), для узагальноної сили знаходимо:

$$A_i = -\frac{\overline{\partial H(q, p)}}{\partial a_i}. \quad (20.12)$$

Величина A_i називається *узагальноною силою*. Кожному зовнішньому параметру відповідає своя узагальнена сила. Наприклад, якщо об'єм V - зовнішній параметр, то тоді робота газу:

$$\delta W = PdV$$

і роль узагальноної сили буде виконувати тиск.

Відзначимо, що (20.12) дає можливість знайти узагальнені сили, як термодинамічні параметри $A_i \equiv \overline{A_i}$. Всі вони, згідно з (20.5), є функціями зовнішніх параметрів і температури. Для того, щоб обчислити їх, необхідно розрахувати середнє значення виразу (20.12), тобто

$$A_i(\theta, a) = \overline{A_i(q, p)} = -\frac{1}{N!} \int \frac{\partial H(q, p)}{\partial a_i} e^{\frac{F-H(q, p)}{\theta}} \frac{dq dp}{h^s}, \quad (20.13)$$

де $A_i(q, p)$ дає значення узагальноної сили в певному мікростані (q, p) .

Нехай в деякому процесі всі n зовнішніх параметрів змінюються на нескінченно малі величини da_i . Такий процес називають *елементарним*. Робота, яку виконує система в елементарному процесі, у відповідності з виразом (20.9) може бути записана у такому вигляді:

$$\delta W = \sum_{i=1}^n \overline{A_i} da_i. \quad (20.14)$$

Звідси видно, що робота δW є параметром макроскопічним, оскільки вона виражається через *усереднені значення* відповідних мікроскопічних величин.

§21. Зв'язок термодинамічних параметрів з вільною енергією системи. (Формула Гіббса-Гемгольца)

Покажемо тепер, як можна термодинамічні параметри виразити через вільну енергію F системи. Для цього спочатку запишемо умову нормування канонічного розподілу:

$$\frac{1}{N!} \int e^{\frac{F-H(q,p)}{\theta}} \frac{dqdp}{h^s} = 1. \quad (21.1)$$

Продиференціюємо тепер вираз (21.1) по змінній θ :

$$\frac{1}{N!} \int \left(-\frac{F-H(q,p)}{\theta^2} + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) \cdot e^{\frac{F-H(q,p)}{\theta}} \cdot \frac{dqdp}{h^s}. \quad (21.2)$$

У лівій частині виразу (21.2) - середнє значення величини, що знаходиться в дужках. Тобто, вираз (21.2) можна записати у вигляді:

$$-\frac{\overline{F-H(q,p)}}{\theta^2} + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} = 0. \quad (21.3)$$

Врахувавши, що середнє значення функції Гамільтона збігається з внутрішньою енергією системи:

$$\overline{H(q,p)} \equiv U, \quad (21.4)$$

то

$$\begin{aligned} -\frac{F-U}{\theta^2} + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta} &= 0; \\ \frac{-F+U}{\theta} + \frac{\partial F}{\partial \theta} &= 0; \\ \frac{-F+U}{\theta} &= -\frac{\partial F}{\partial \theta}; \\ -F+U &= -\theta \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta}. \end{aligned}$$

З врахуванням останнього співвідношення вираз (21.3) набуває вигляду:

$$U = F - \theta \cdot \frac{\partial F}{\partial \theta}. \quad (21.5)$$

Формула (21.5) пов'язує внутрішню енергію з вільною енергією і називається *формулою Гіббса-Гемгольца*. Формула (21.5) виражає зв'язок вільної і внутрішньої енергії. Вона буде використовуватись під час виведення виразу для першого закону термодинаміки. Можна також встановити зв'язок між вільною енергією і узагальненою силою. Цей зв'язок має такий вигляд:

$$A_i = -\frac{\partial F}{\partial a_i}. \quad (21.6)$$

Вираз (21.6) записується для випадку, коли зовнішній параметр α_i набуває простого вигляду, тоді

$$P = - \frac{\partial F}{\partial V}. \quad (21.7)$$

Зауваження: формула (21.7) може бути отримана різними незалежними способами та буде використовуватись для виведення рівняння як ідеального так і реального стану газу.

Наведемо такий приклад: якщо об'єм газу змінюється на величину dV , то робота, яку у цьому виконує система, знаходиться згідно з виразом:

$$\delta W = PdV. \quad (21.8)$$

Звідси видно, що роль узагальненої сили, яка відповідає об'єму V , відіграє тиск газу P в системі. У цьому випадку формула (21.6) набуває вигляду (21.7).

Вираз (21.7) пов'язує для простої системи параметри P , V і T . Нагадаємо, що *проста система* - це така система, яка має тільки один зовнішній параметр - об'єм V . У загальному випадку (21.7) можна записати у вигляді:

$$\varphi(P, V, T) = 0, \quad (21.9)$$

де φ - деяка функція.

Цей функціональний зв'язок між P , V і T називається *рівнянням стану системи*. Таким чином, (21.7) дає можливість знайти рівняння стану, знаючи вираз для вільної енергії системи.

Лекція 7. ПЕРШИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ ТА ЙОГО ОСОБЛИВОСТІ

§22. Функції стану і функції процесу.

§23. Перший закон термодинаміки для елементарних процесів.

§24. Перший закон термодинаміки для скінчених і замкнутих процесів. Поняття про вічний двигун першого роду.

[1. §1.2, §1.5, §5.2; 2. §2.2; 4. §5-§8; 5. §4.1, §4.2; 6. §20; 7. §4; 8. III.1]

§22. Функції стану і функції процесу

Запишемо співвідношення для внутрішньої енергії системи у вигляді:

$$U = \bar{H} = \frac{1}{N!} \int H(q, p, a) e^{\frac{F-H(q,p)}{\theta}} \frac{dqdp}{h^s}. \quad (22.1)$$

Очевидно, з виразу (22.1) випливає, що внутрішня енергія системи буде залежати від тих же термодинамічних параметрів і температури, які описують стан системи, що і функція Гамільтона. Тобто, $U = U(\theta, a)$ або для простої системи $U = U(\theta, V)$. Інакше кажучи, *внутрішня енергія є функцією стану системи*, і кожному макроскопічному стану, що характеризується термодинамічними параметрами (θ, a) , можна зіставити певне значення внутрішньої енергії системи.

Нехай всі зовнішні параметри системи змінюються на нескінченно малу величину da , а температура системи змінюється на величину $d\theta$. Нагадаємо, що такий процес ми називали *елементарним процесом*. Зміна внутрішньої енергії в цьому процесі буде залежати від $d\theta$ і da , а значить буде повним диференціалом і буде рівна dU . Якщо система буде здійснювати перехід між макростанами із значеннями термодинамічних параметрів (θ_1, a_1) та (θ_2, a_2) , то зміна внутрішньої енергії в цьому процесі може бути записана у вигляді:

$$\Delta U_{12} = \int_{(\theta_1, a_1)}^{(\theta_2, a_2)} dU = U(\theta_2, a_2) - U(\theta_1, a_1). \quad (22.2)$$

Таким чином, зміна внутрішньої енергії залежить від параметрів початкового та кінцевого станів системи і не залежить від параметрів проміжних станів, через які проходить система в даному процесі або, як кажуть, не залежить від «форми шляху переходу» (це є наслідок того, що dU - повний диференціал). Зауважимо, що в статистичній термодинаміці, крім внутрішньої енергії, важливу роль відіграють і інші функції стану, наприклад, вільна енергія, ентропія тощо.

Розглянемо тепер роботу, яку виконує система в елементарному процесі:

$$\delta W = \sum_{i=1}^n \bar{A}_i da_i, \quad (22.3)$$

де $\bar{A}_i = \overline{A_i(\theta, a)}$ і є вже усередненим, тобто *макроскопічним* параметром. Видно, що вираз (22.3) не містить диференціалу $d\theta$, а отже, (22.3) не буде повним диференціалом функції, що залежить від

параметрів стану θ та a . Таким чином, *елементарна робота не являється повним диференціалом*. Звідси, як наслідок, впливає те, що робота, яку виконує система під час переходу між станами (θ_1, a_1) та (θ_2, a_2) , залежить не тільки від параметрів цих станів (початкового та кінцевого), а й від параметрів всіх проміжних станів. Тобто можна сказати, що робота, яку виконує система, залежить від «форми шляху переходу». На рисунку 22 в усіх трьох процесах робота була різною. Тому кажуть, що *робота є функцією процесу*.

Таким чином, до всього сказаного можна зробити такий висновок: *внутрішня енергія* будь-якого макроскопічного тіла являє собою енергією теплового руху і взаємодії молекул, з яких побудоване це тіло. Важливе значення внутрішньої енергії в термодинаміці зумовлено законом збереження енергії. Встановлення особливостей перетворення внутрішньої енергії в інші види або передачі її іншим тілам і складає основну задачу термодинаміки.

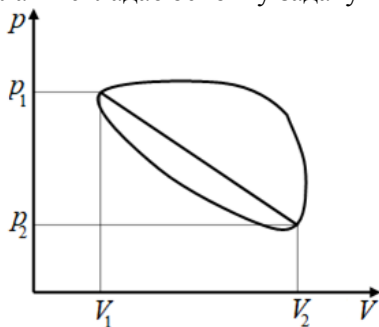


Рис. 22

Будь-який спосіб зміни внутрішньої енергії, що пов'язаний із зміною зовнішніх параметрів системи, називається *роботою*.

Такий спосіб передачі енергії, що не пов'язаний із зміною зовнішніх параметрів системи, називається *теплообміном або теплопередачею*. Кількісна характеристика цієї зміни називається *кількістю теплоти*. Очевидно, що в елементарному процесі кількість теплоти не буде повним диференціалом (оскільки не буде залежати від зміни зовнішніх параметрів системи). Всі величини, які в елементарних процесах не є повними диференціалами, ми будемо записувати з допомогою символу δ (а не d), наприклад, робота в елементарному процесі буде записуватись у вигляді δW , а кількість теплоти - δQ . Таким чином, терміни «робота» і «теплота» служать для того, щоб вказати спосіб переходу енергії від одних тіл до інших.

Тому зрозуміло, що δW і δQ є характеристиками процесу, що виконується системою або, як кажуть, є *функціями процесу*.

§23. Перший закон термодинаміки для елементарних процесів

Після короткого аналізу основних понять можна отримати вираз для першого закону термодинаміки. Спочатку нагадаємо співвідношення, згідно з яким вводиться такий термодинамічний параметр як *внутрішня енергія системи*:

$$U = \int H(q, p, a) \rho(q, p) \frac{dq dp}{h^s}. \quad (23.1)$$

Візьмемо тепер повний диференціал від виразу (23.1):

$$dU = \int \sum_{i=1}^n \frac{\partial H}{\partial a_i} da_i \cdot \rho(q, p) \frac{dq dp}{h^s} + \int H(q, p, a) [d\rho(q, p)] \frac{dq dp}{h^s}. \quad (23.2)$$

Змінівши порядок виконання операцій інтегрування та сумування, вираз (23.2) можна записати у вигляді:

$$dU = \sum_{i=1}^n da_i \int \frac{\partial H}{\partial a_i} \cdot \rho(q, p) \frac{dq dp}{h^s} + \int H(q, p, a) [d\rho(q, p)] \frac{dq dp}{h^s}. \quad (23.3)$$

Врахувавши, що $\frac{\partial H}{\partial a_i} = -A_i(q, p)$, то

$$\int \frac{\partial H}{\partial a_i} \cdot \rho(q, p) \frac{dq dp}{h^s} = -\overline{A_i}, \quad (23.4)$$

а також, що $\overline{A_i} da_i = \delta W$, для dU отримаємо:

$$dU = -\delta W + \int H(q, p, a) [d\rho(q, p)] \frac{dq dp}{h^s}. \quad (23.5)$$

Перший доданок в (23.5) відповідає зміні внутрішньої енергії системи, що відбувається за рахунок зміни зовнішніх параметрів, тобто за рахунок виконання роботи. Другий же доданок в (23.5) описує зміну внутрішньої енергії системи, що відбувається без зміни зовнішніх параметрів (тобто без виконання роботи). Такий спосіб зміни внутрішньої енергії ми називали *теплообміном* або *теплопередачею*, а його кількісну характеристику - *кількістю теплоти*, яку будемо надалі позначати для елементарного процесу δQ :

$$\delta Q = \int H(q, p, a) [d\rho(q, p)] \frac{dq dp}{h^s}. \quad (23.6)$$

Тоді (23.5) набуває вигляду:

$$dU = \delta Q - \delta W. \quad (23.7)$$

Вираз (23.7) описує *перший закон термодинаміки* для *елементарних процесів*. Зауважимо, що перший закон термодинаміки відображає закон збереження енергії в застосуванні до теплових процесів. Фізична суть виразу (23.7) може бути сформульована так: *в той час, коли кількість теплоти δQ і виконана робота δW в елементарному процесі є неповними диференціалами, їх різниця є повним диференціалом функції стану - внутрішньої енергії dU .*

§24. Перший закон термодинаміки для скінченних і замкнутих процесів. Поняття про вічний двигун першого роду

Розглянемо тепер формулювання першого закону термодинаміки для таких процесів, коли зміна величини θ та a скінченна, тобто система переходить із стану з параметрами (θ_1, a_1) в стан (θ_2, a_2) , проходячи певну сукупність проміжних станів, яку позначимо через ℓ (тобто ℓ - це «траєкторія переходу», про яку говорилося вище). Для того, щоб отримати відповідний вираз, проінтегруємо (23.7) в межах вказаної «траєкторії переходу»:

$$\int_{(1\ell 2)} dU = \int_{(1\ell 2)} \delta Q - \int_{(1\ell 2)} \delta W, \quad (24.1)$$

де $\int_{(1\ell 2)} \delta Q = Q_{(1\ell 2)}$ - кількість теплоти, отримана системою під час переходу із стану з параметрами (θ_1, a_1) в стан (θ_2, a_2) , по «траєкторії переходу» ℓ ; $\int_{(1\ell 2)} \delta W = W_{(1\ell 2)}$ - робота, виконана системою в тому ж процесі.

З формули (21.4) відразу знаходимо:

$$\begin{aligned} \Delta U_{12} &= U(\theta_2, a_2) - U(\theta_1, a_1) = \\ &= \int_{(1\ell 2)} \delta Q - \int_{(1\ell 2)} \delta W = Q_{(1\ell 2)} - W_{(1\ell 2)}. \end{aligned} \quad (24.2)$$

Вираз (24.2) і описує *перший закон термодинаміки для скінченного процесу*.

Сформулюємо тепер перший закон термодинаміки для *замкнутих процесів* (це такі процеси, під час перебігу яких система повертається в початковий стан). Для цього проінтегруємо вираз

(23.7) вздовж замкнутої «траєкторії»:

$$\oint dU = \oint \delta Q - \oint \delta W. \quad (24.3)$$

Оскільки в замкнутому процесі $\oint dU = 0$ (оскільки система повертається в початковий стан), то з виразу (24.3) випливає, що

$$\oint \delta Q = \oint \delta W, \quad (24.4)$$

де $\oint \delta Q$ - це кількість теплоти, яку система отримує в замкнутому процесі; $\oint \delta W$ - сумарна робота, яку виконує система в замкнутому процесі.

З виразу (24.4) видно, що в замкнутому процесі система виконує роботу за рахунок притоку теплоти, і якщо система в такому процесі не отримує теплоти, то і не виконує роботи, тобто коли $\oint \delta Q = 0$, то і $\oint \delta W = 0$.

Пристрій, який здійснює замкнуті процеси і виконує роботу без притоку теплоти ззовні, називається *вічним двигуном першого роду*. Звідси випливає ще одне формулювання першого закону термодинаміки (для замкнутих процесів): *вічний двигун першого роду створити неможливо*.

Лекція 8. ДРУГИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ ДЛЯ РІВНОВАЖНИХ ПРОЦЕСІВ

§25. Рівноважні процеси. Оборотні та необоротні процеси.

§26. Другий закон термодинаміки для рівноважних (квазістатичних) процесів.

§27. Ентропія як міра хаосу, міра інформації системи.

§28. Закон зростання ентропії.

[1. §1.6, §4.4, §5.3; 2. §1.9-§1.11; 4. §13, §17, §18, §20, §21; 5. §4.3, §5.2; 6. §21-§23, §25; 7. §10, §26, §27; 8. §III.2, III.3]

§25. Рівноважні процеси. Оборотні та необоротні процеси

До цих пір ми вивчали системи, що перебували в стані термодинамічної рівноваги. Розглянемо дещо детальніше можливі процеси переходу системи з одного стану в інший. Якщо процес зміни зовнішніх параметрів системи відбувається дуже повільно, то

відхилення від рівноважного стану системи, що викликані цим процесом, є малими. Тоді можна наближено вважати, що система в кожний момент часу знаходиться в тому стані термодинамічної рівноваги, в який вона прийшла б, коли б подальші зміни зовнішніх параметрів припинились, починаючи з цього моменту часу. Такі переходи, які відбуваються настільки повільно, що відхиленнями від рівноважного стану в будь-який момент можна знехтувати, навиваються *квазістатичними* або *рівноважними*. Тобто *квазістатичні (рівноважні) процеси* - це такі процеси, в ході яких система послідовно проходить через ряд рівноважних станів. Квазістатичний процес легко собі уявити, якщо в системі проходить такий процес, реальна швидкість якого v набагато менша швидкості відновлення рівноваги v_0 : $v \ll v_0$. Під *швидкістю процесу* ми будемо розуміти швидкість тієї зовнішньої дії, яка виводить систему зі стану термодинамічної рівноваги. Нагадаємо, що швидкість відновлення рівноваги в системі називається *швидкістю релаксації*, а час, протягом якого в системі відновлюється рівноважний стан, називається *часом релаксації*. Так ось, якщо має місце співвідношення $v \ll v_0$, то за реальних змін у системі, що відбувається з малою швидкістю, рівновага відновлюється з великою швидкістю. Тому можна вважати, що в даному випадку за реальної зміни станів макроскопічної системи ця система проходить через ряд послідовних рівноважних станів.

Розглянемо тепер фізичні умови, за яких процеси фактично є рівноважними або квазістатичними. З цією метою припустимо, наприклад, що тиск в макроскопічній системі A дорівнює P , а в термостаті B - $P + dP$. Тоді за рахунок нескінченно малого перепаду тиску почнеться процес вирівнювання тиску, тобто система A буде стискуватись. Якби перепад тисків дорівнював нулю, то очевидно, що такий процес був би відсутнім, і його швидкість дорівнювала б нулю ($v = 0$). За нескінченно малої різниці тисків в системах A та B швидкість процесу можна вважати нескінченно малою, тоді як швидкість v_0 відновлення рівноваги в газі має скінченну величину. Тому $v \ll v_0$ і процес стискування газу буде проходити через послідовність рівноважних станів, тобто *квазістатично*. Такий процес буде також і *оборотним*. Це означає, що за нескінченно малих змін умов процес піде в оберненому напрямку. Тобто за умови, коли тиск газу буде не P , а $P + dP$, а поршня - P , то газ почне розширюватись, проходячи квазістатично через ті ж стани, але в

оберненому порядку.

Отже, *оборотними процесами* називають такі процеси, які можуть проходити як в прямому, так і в оберненому напрямках без помітних (скінченних) змін в оточуючому середовищі. (Зв'язок, який існує між оборотністю процесів та зміною ентропії в них буде обговорено в питанні «Закон зростання ентропії» та в у розгляді питання «Другий закон термодинаміки для нестатичних процесів»).

Таким чином, будь-який квазістатичний процес можна вважати *рівноважним*, тобто *оборотним*. У загальному випадку, як і в розглянутому прикладі з розширенням газу, коли має місце нескінченно мала різниця будь-яких інтенсивних параметрів (температури, тиску, концентрації, електричного потенціалу та ін.) між системами A та B , в макроскопічній системі будуть проходити квазістатичні процеси, в результаті яких відбудеться вирівнювання цих параметрів.

Якщо ж швидкість процесу набагато більша, ніж швидкість відновлення рівноважного стану: $v \gg v_0$, то процес називається *нестатичним* або *нерівноважним*. У цьому випадку швидкість зміни стану системи перевищує швидкість відновлення рівноваги, і система проходить через ряд нерівноважних або нестатичних станів. Така фізична ситуація зустрічається завжди, коли є скінченний перепад (або градієнт) інтенсивних параметрів систем A та B (в цьому випадку швидкість процесу v буде скінченною і може перевищувати v_0). Ці процеси називаються також і *необоротними*, оскільки нескінченно малих змін кінцевому стані буде недостатньо, щоб повернути систему в початковий стан (мається на увазі, що процес не можна обернути без скінченних змін в оточуючому середовищі).

Виходячи з розглянутого прикладу, можна дати загальне означення квазістатичних і нестатичних процесів: якщо в деякому процесі зміна якого-небудь параметра (або кількох параметрів), що визначає рівноважний стан системи, призводить до порушення рівноваги в цій системі, і коли ця зміна відбувається за дуже малий час, порівняно з часом релаксації, то такий процес називається *нестатичним*. Якщо ж зміна його параметра в певному процесі відбувається за час, набагато більший часу релаксації, то такий процес називається *квазістатичним*.

Більшість природних процесів проходить з нескінченною швидкістю і тому є *нестатичними, нерівноважними, необоротними*.

§26. Другий закон термодинаміки для рівноважних (квазістатичних) процесів

Отримаємо тепер вираз другого закону термодинаміки для квазістатичних процесів. Нагадаємо формулу, яка пов'язує вільну енергію системи F з її внутрішньою енергією U та ентропією S :

$$S = \frac{U - F}{T}. \quad (26.1)$$

Візьмемо повний диференціал від правої і лівої частини формули (26.1). Разом з тим врахувавши, що внутрішня та вільна енергії системи залежать від абсолютної температури та зовнішніх параметрів, всю сукупність яких ми позначимо a тобто $U = U(T, a)$, $F = F(T, a)$:

$$dS = \frac{dU - dF}{T} - \frac{U - F}{T^2} dT. \quad (26.2)$$

Перетворимо цю формулу, врахувавши, що повний диференціал від F має вигляд:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial T} dT + \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial a_i} da_i, \quad (26.3)$$

а також, що $A_i = -\frac{\partial F}{\partial a_i}$. У результаті отримаємо:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial T} dT - \sum_{i=1}^n A_i da_i. \quad (26.4)$$

Підставляючи в цей вираз значення роботи

$$\delta W = \sum_{i=1}^n A_i da_i$$

формулу (26.4) запишемо у вигляді:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial T} dT - \delta W. \quad (26.5)$$

Підставимо тепер отриманий вираз для dF у формулу (26.2):

$$\begin{aligned} dS &= \frac{dU - \frac{\partial F}{\partial T} dT + \delta W}{T} - \frac{U - F}{T^2} dT = \\ &= \frac{dU + \delta W}{T} - \frac{U - F + T \frac{\partial F}{\partial T}}{T^2} dT. \end{aligned} \quad (26.6)$$

Останній доданок в цій формулі дорівнює нулю через співвідношення Гіббса-Гельмгольца:

$$U - F + T \frac{\partial F}{\partial T} = 0.$$

Врахувавши також вираз для першого закону термодинаміки

$$dU + \delta W = \delta Q,$$

де δQ - кількість теплоти, яку отримує система в елементарному процесі.

З формули (26.6) отримаємо:

$$dS = \frac{\delta Q}{T}. \quad (26.7)$$

Це співвідношення і є *математичним виразом для другого закону термодинаміки для квазістатичних процесів*.

Сформулюємо тепер фізичний зміст співвідношення (26.7). Відомо, що кількість теплоти δQ , яку отримує система в елементарному процесі, не є повним диференціалом. Фізично це означає, що під час переходу системи з одного стану в інший різними «шляхами», тобто, реалізуючи кожного разу різні послідовності проміжних станів, кількість теплоти δQ , яку отримує система в елементарному процесі, буде різною на кожному такому шляху (нагадаємо, що кількість теплоти є функція процесу!). Вираз (26.7) показує, що величина $\frac{\delta Q}{T}$ вже не залежить від вибору проміжних станів, оскільки є повним диференціалом деякої функції стану - *ентропії*. Тому можна сказати, що другий закон термодинаміки стверджує, що існує *деяка функція стану системи - ентропія, повний диференціал якої дорівнює $\frac{\delta Q}{T}$* . В цьому і полягає суть другого закону термодинаміки. Зауважимо, що формула (26.7) є означенням ентропії в феноменологічній термодинаміці.

$$(dS)_1 = (dS)_2.$$

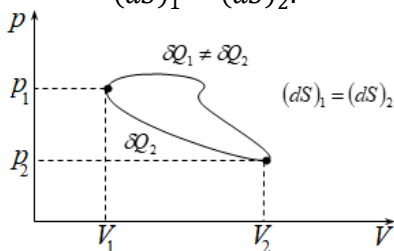


Рис. 23

Пояснимо, що система переходить з стану з параметрами p_1, V_1 в стан з параметрами p_2, V_2 . В першому стані система отримує

кількість теплоти δQ_1 , а в другому - $\delta Q_2 \neq \delta Q_1$. Зміна ентропії буде однаковою (рис. 23):

Розглянемо тепер другий закон термодинаміки для таких процесів, коли зміна величин θ та a скінченна, тобто система переходить із стану з параметрами (θ_1, a_1) в стан (θ_2, a_2) . Для цього проінтегруємо (26.7), взявши як межі, параметри цих двох станів:

$$(\theta_2, a_2) - S(\theta_1, a_1) = \int_{(\theta_1, a_1)}^{(\theta_2, a_2)} \frac{\delta Q}{T}. \quad (26.8)$$

Вираз (26.8) описує *другий закон термодинаміки для скінченних процесів*.

Отримаємо співвідношення для другого закону термодинаміки у випадку, коли процес замкнутий. Для цього проінтегруємо вираз (26.7) вздовж замкнутого контура:

$$\oint dS = \oint \frac{\delta Q}{T}. \quad (26.9)$$

Оскільки в замкнутому процесі $\oint dS = 0$, то з (26.9) маємо:

$$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0. \quad (26.10)$$

Співвідношення (26.10) описує *другий закон термодинаміки для замкнутих процесів*.

Зауважимо, що за феноменологічної побудови термодинаміки перший та другий закони термодинаміки розглядаються як постулати, сформульовані в результаті узагальнення великої кількості експериментальних даних. Перевага ж використаного нами статистичного підходу не тільки в тому, що закони термодинаміки виводяться з мікроскопічних уявлень про будову речовини і дозволяють таким чином глибше зрозуміти їх фізичну суть, а і в тому, що статистичний підхід дає можливість встановити межі застосування феноменологічної термодинаміки.

§27. Ентропія як міра хаосу, міра інформації системи

Статистичне означення ентропії системи було дано за допомогою співвідношення:

$$S = k \ln W. \quad (27.1)$$

У виразі (27.1) $W = \frac{\Delta\Gamma}{h^s}$ - число мікростанів, що реалізують стан термодинамічної рівноваги системи ($\Delta\Gamma$ - об'єм фазового простору, в якому зосереджені всі мікростани, що реалізують стан

термодинамічної рівноваги системи, оскільки $W \geq 1$, то $S \geq 0$).

Розглянемо такий уявний експеримент. Припустимо, що можна було б реалізувати таку ситуацію, коли система перебувала б у фіксованому мікростані або, іншими словами, був би тільки один мікростан, що реалізував би стан термодинамічної рівноваги системи (рис. 24).

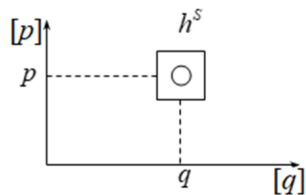


Рис. 24

Тоді W було б рівне одиниці, а $\Delta\Gamma = h^S$, тобто точно було б відомо, що фазова точка системи перебуває в об'ємі фазового простору, величиною h^S . У цьому випадку координати та проекції імпульсів всіх частинок системи були б відомі з максимально можливою точністю (що, звичайно, не протирічить співвідношенню невизначеностей Гейзенберга). Тоді *інформація про систему була б максимально можливою, а ентропія системи була б мінімальною*. Тобто, чим меншим числом мікростанів W реалізується даний макроскопічний стан системи і чим меншим є об'єм $\Delta\Gamma$, в якому рухається фазова точка системи, тим більшою є інформація про систему (у розумінні її точності), і тим меншим буде значення ентропії в такому стані (у відповідності з (27.1)). І навпаки, чим більшим буде W , тобто, чим більшим буде об'єм $\Delta\Gamma$, в якому рухається фазова точка системи, тим меншою буде інформація про систему (тобто, менш точною), оскільки фазова точка системи може перебувати в будь-якій частині цього об'єму $\Delta\Gamma$. Тому тим більшим буде значення ентропії системи в цих станах. Таким чином, *зростання ентропії призводить до зменшення інформації про мікростан системи, за цих умов максимальна ентропія відповідає мінімальній інформації*. У цьому розумінні ентропію вважають мірою інформації. Разом з тим можна сказати, що ентропія є мірою хаосу (тобто невпорядкованості) в системі. Дійсно, за мінімальної ентропії координати та проекції імпульсів частинок системи відомі з максимально можливою точністю (що не протирічить співвідношенню невизначеностей Гейзенберга). За зростання ентропії невизначеність координат та проекцій імпульсів частинок системи збільшується, фазова точка системи може рухатись в більшому за величиною об'ємі фазового простору $\Delta\Gamma$. Тобто хаос в системі у цьому випадку зростає.

На основі простих кількісних співвідношень можна показати,

що ентропія є мірою хаосу в системі. Для цього скористаємося формуло:

$$F = -NkT \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + 1 \right). \quad (27.2)$$

Маючи вираз для вільної енергії системи, легко знайти ентропію системи:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{5}{2} \right). \quad (27.3)$$

Вираз (27.3) дійсно демонструє зв'язок ентропії з мірою хаосу, оскільки з цієї формули видно, що ентропія зростає, коли зростає об'єм V (при цьому збільшуються невизначеності координат частинок), а також коли зростає температура системи T (при цьому збільшуються невизначеності проекцій імпульсів частинок). З виразу (27.3) видно, що ентропія є величиною адитивною (оскільки ентропія у цій формулі пропорційна числу частинок N , а концентрація газу $\frac{N}{V}$ залишається постійною).

§28. Закон зростання ентропії

Перейдемо тепер до закону зростання ентропії, тобто покажемо, що в усіх процесах, які можуть відбуватися в ізолюваній системі, ентропія системи не зменшується, якщо знехтувати флуктуаціями. Іншими словами, в ізолюваній системі ентропія може тільки зростати або залишатись незмінною.

Статистичне означення ентропії системи, яке було дано за допомогою співвідношення

$$S = k \ln W,$$

стосувалось лише стану термодинамічної рівноваги. Сформулюємо умови, за виконання яких поняття ентропії можна використовувати і для нерівноважних систем. Будь-яку нерівноважну систему можна розбити на певну кількість малих квазінезалежних (але макроскопічних!) підсистем, кожна з яких перебуває в рівноважному стані. Таке розбиття можливе, якщо виконується умова

$$\tau \leq \Delta\tau \leq \tau_0,$$

де τ - час релаксації підсистеми, τ_0 - час релаксації всієї системи, $\Delta\tau$ -

час, протягом якого розглядається ця мала підсистема в тій чи іншій задачі.

Якщо таке розбиття можливе і ентропія кожної підсистеми визначається згідно з виразом (27.1), то в силу адитивності, ентропія всієї нерівноважної системи S_H може бути визначена як сума ентропій всіх підсистем:

$$\begin{aligned} S_H &= S_1 + S_2 + \dots + S_n = k(\ln W_1 + \ln W_2 + \dots + \ln W_n) = \\ &= k \ln(W_1 \cdot W_2 \cdot \dots \cdot W_n) = k \ln W_H, \end{aligned} \quad (28.1)$$

де W_H можна розглядати як число мікростанів, що реалізують нерівноважний стан системи ($W_H = W_1 \cdot W_2 \cdot \dots \cdot W_n$). У цьому випадку можна сказати, що *ентропія довільного макроскопічного стану* (в тому числі і нерівноважного) *визначається логарифмом числа мікростанів, які його реалізують*.

Як уже відзначалось раніше, число мікростанів, що реалізують стан термодинамічної рівноваги, набагато більше, ніж число мікростанів, що реалізують нерівноважний стан. Тому фазова точка системи в процесі еволюції практично весь час буде рухатись в області фазового простору, де знаходяться мікростани, що реалізують стан термодинамічної рівноваги системи. Отже, згідно з статистичним означенням (27.1) *ентропія буде максимальною в рівноважному стані*, а це значить, що в будь-якому нерівноважному стані ентропія буде меншою, ніж в стані термодинамічної рівноваги. У зв'язку з тим, що замкнута система спонтанно, в силу теплового руху, приходить до рівноважного стану, то *ентропія нерівноважних систем у процесі встановлення рівноваги зростає*. Це твердження називається *законом зростання ентропії*. Дійсно, якщо в початковий момент часу система перебувала в нерівноважному стані, то її фазова точка рухалась тоді в тих областях фазового простору, де знаходяться мікростани, що реалізують нерівноважний стан системи. Оскільки нерівноважних мікростанів набагато менше, ніж рівноважних, то зрозуміло, що під час руху фазової точки у фазовому просторі в наступні моменти часу вона з подавляючою ймовірністю спочатку попаде в менш нерівноважні стани, а потім - і в рівноважні, в яких практично весь час і буде перебувати. В рівноважних станах ентропія системи буде максимальною.

Зміст ентропії, як параметра стану системи, в тому і полягає,

що ентропія характеризує «ступінь нерівноважності» системи. Тоді відхилення від рівноваги буде тим більшим, чим меншим буде значення ентропії у порівнянні з її значенням в стані термодинамічної рівноваги.

Сформульований нами закон зростання ентропії необхідно уточнити, врахувавши можливість флуктуацій, тобто можливість відхилень від стану термодинамічної рівноваги. Розглянемо тепер формулювання закону зростання ентропії за врахування флуктуацій. Для простоти скористаємось тільки якісними міркуваннями. Розглянемо шматок поверхні постійної енергії (рис. 25).

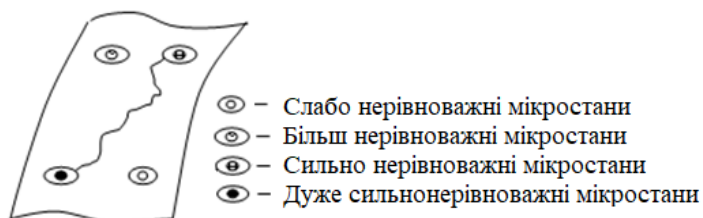


Рис. 25

Якщо система перебуває в стані термодинамічної рівноваги, коли ентропія максимальна, то її фазова точка в процесі еволюції практично весь час рухається в області фазового простору, де знаходяться переважно такі мікростани, що реалізують стан термодинамічної рівноваги системи. Число нерівноважних мікростанів поблизу цієї області набагато менше числа рівноважних мікростанів, і тому ймовірність попадання фазової точки в ці нерівноважні мікростани надзвичайно мала. Але можлива така ситуація, коли фазова точка системи попаде в нерівноважні мікростани. Тоді ентропія системи зменшиться. У наступні моменти часу фазова точка системи з переважною ймовірністю вийде з області нерівноважних мікростанів і буде рухатись серед мікростанів, що реалізують стан термодинамічної рівноваги. Тоді ентропія системи знову зросте і набуде попереднього максимального значення (рис. 26).

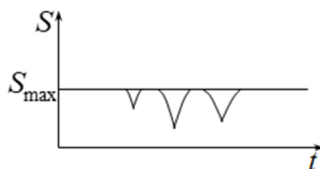


Рис.26

Якщо ж в початковий момент часу система перебувала в нерівноважному

стані, то її фазова точка рухалась тоді в тих областях фазового простору, де знаходяться мікростани, що реалізують нерівноважний стан системи.

Оскільки ще більш нерівноважних мікростанів набагато менше, ніж помірно нерівноважних, то, зрозуміло, ймовірність їх реалізації ще менша, ніж для помірно нерівноважних. Якщо ж все-таки фазова точка попаде в ці більш нерівноважні мікростани, то ентропія системи стане ще меншою (рис. 27).

Але в наступні моменти часу фазова точка системи з переважною ймовірністю перейде в менш нерівноважні мікростани. Цей процес супроводжуватиметься зростанням ентропії до тих пір, поки система не перейде в стан термодинамічної

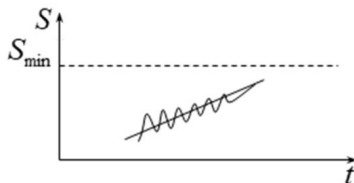


Рис. 27

рівноваги з максимальним значенням ентропії. Таким чином, на фоні зростання ентропії в процесі переходу системи до рівноважного стану можливі малі зменшення (внаслідок флуктуацій). Отже, закон зростання ентропії має статистичну (ймовірнісну) природу і з урахуванням всього сказаного його можна сформулювати так: *ентропія ізольованої системи, яка перебуває в стані термодинамічної рівноваги з переважною ймовірністю залишається сталою та максимальною. Якщо ж ізольована система перебуває в нерівноважному стані, то в наступні моменти часу її ентропія буде з переважною ймовірністю зростати до тих пір, поки система не перейде в стан термодинамічної рівноваги з максимальним значенням ентропії.*

Зауважимо, що відносна величина флуктуацій досить мала:

$$\frac{\Delta S}{S} \sim \frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \sim 10^{-11}.$$

Тому в багатьох ситуаціях ними можна знехтувати. Тоді закон зростання ентропії можна формулювати так, як це було зроблено раніше: *для всіх замкнутих систем, які реалізуються в природі, ентропія ніколи не зменшується - вона або зростає, або, в граничному випадку, залишається постійною.* У відповідності з цим, всі процеси які відбуваються з макроскопічними тілами, прийнято

поділяти на *необоротні* та *оборотні*.

Необоротними називають такі процеси, під час протікання яких ентропія всієї замкнутої системи зростає і які не можуть відбуватися в протилежному напрямку, коли система проходить через ті ж самі мікростани, але в зворотному порядку, оскільки ентропія у цьому випадку повинна зменшуватись.

Оборотні процеси - це такі процеси, під час яких ентропія всієї замкнутої системи залишається постійною і які можуть проходити в зворотному напрямку.

Зрозуміло, що повністю оборотний процес є фізичною ідеалізацією. Всі реальні процеси в природі можуть бути оборотними лише з тією чи іншою точністю.

Лекція 9. ДРУГИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ ДЛЯ НЕСТАТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

§29. Другий закон термодинаміки для нестатичних процесів.

§30. Нерівність Клаузіуса або другий закон термодинаміки для нестатичних процесів і неізолюваних систем.

§31. Фізичні наслідки другого закону термодинаміки. Поняття про вічний двигун другого роду.

[1. §1.6, §5.3; 2. §2.6; 4. §13, §14, §17-§21; 5. §4.3, §5.2; 6. §26-§28; 7. §11, §24; 8. §III.4, §III.5]

§29. Другий закон термодинаміки для нестатичних процесів

Розглянемо систему, що перебуває в рівновазі з термостатом, вважаючи сукупність цих двох систем разом - термостата та системи в термостаті - ізолюваною системою (рис. 28). Припустимо, що термостат віддає системі деяку кількість теплоти δQ_H в *нестатичному процесі*. Тоді ентропія ізолюваної системи - термостата та системи в термостаті - буде зростати, згідно з законом зростання ентропії. Тобто, якщо dS_T - зміна ентропії

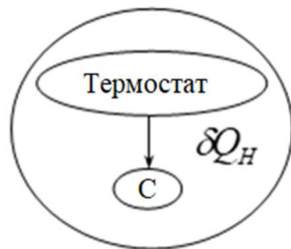


Рис. 28

термостата, а dS_C - зміна ентропії системи в термостаті, тоді

$$dS_C + dS_T > 0. \quad (29.1)$$

Звідси

$$dS_C > -dS_T. \quad (29.2)$$

Запишемо перший закон термодинаміки для термостата:

$$\delta Q_H = dU + \delta W_T. \quad (29.3)$$

Згідно з означенням термостата вважають, що під час теплообміну залишаються незмінними всі його зовнішні параметри та температура, тобто,

$$\delta W_T = \sum_{i=1}^n \bar{A}_i da_i = 0. \quad (29.4)$$

Отже, для термостата маємо:

$$\delta Q_H = dU. \quad (29.5)$$

З цього виразу видно, що в даному нестатичному процесі кінцевий стан термостата буде таким же, як і тоді, коли теплота δQ_H передавалась квазістатичним способом, оскільки зміна внутрішньої енергії термостата dU як функції стану, визначається лише початковим та кінцевим станами системи і не залежить від того, який процес виконувала система - квазістатичний чи нестатичний. У зв'язку з тим, що ентропія - функція стану, а кінцевий стан термостата в даному нестатичному процесі такий же, як і в квазістатичному процесі, то зміну ентропії термостата можна знайти, скориставшись другим законом термодинаміки для квазістатичних процесів:

$$dS_T = -\frac{\delta Q_H}{T}. \quad (29.6)$$

Знак «мінус» в цій формулі відображає той факт, що термостат віддає теплоту. Якщо (29.6) підставити в (29.2), то в результаті отримаємо:

$$dS_C > \frac{\delta Q_H}{T}. \quad (29.7)$$

Це співвідношення і описує другий закон термодинаміки для нестатичних процесів в ізольованих системах. Отже, *всі нестатичні процеси в ізольованих системах проходять так, що ентропія кінцевого стану більша ентропії початкового, тобто, ентропія зростає*. Зміст другого закону термодинаміки для нестатичних процесів можна сформулювати й так: *якщо внаслідок нестатичного процесу ізольована система перейшла з одного рівноважного стану з ентропією S_1 в рівноважний стан з ентропією S_2 , то*

$$S_2 > S_1. \quad (29.8)$$

Обговоримо тепер питання про оборотність процесів. Зростання ентропії ізолюваної системи в нестатичних процесах забезпечує одночасно їх односторонність та необоротність (але енергія системи не змінюється). У цьому випадку треба правильно розуміти термін «необоротний процес». *За перебігу необоротного процесу ізолювана система не може сама, без зовнішнього впливу, повернутись в початковий стан.* Так, наприклад, система, що була нагріта до певної температури, вистигає. Після цього вона сама не може перейти знову до попереднього стану з вищою температурою.

Всі реальні процеси в природі фактично необоротні. Якщо знехтувати втратами енергії під час тертя, чи втратами теплоти, що виділяється під час проходження електричного струму тощо, то *наближено* можна вважати оборотними механічні та електромагнітні явища. Точно так само в *термодинаміці вважаються оборотними рівноважні процеси, оскільки їх перебіг в ізолюваній системі не приводить до зростання ентропії ($dS = 0$)*. Зрозуміло, що реально здійснити такі процеси практично неможливо, оскільки вони являють собою послідовність рівноважних станів. Отже, рівноважні (оборотні) процеси є ще одним прикладом фізичної ідеалізації, яка значно спрощує вивчення процесів передачі та перетворення енергії.

§30. Нерівність Клаузіуса або другий закон термодинаміки для нестатичних процесів і неізолюваних систем

Ми розглянули різні формулювання другого закону термодинаміки як для квазістатичних процесів, так і для нестатичних, але за умови адіабатичної ізоляції, тобто термостата та системи, що перебуває в рівновазі з термостатом. Отримаємо тепер вираз для другого закону термодинаміки у випадку, коли адіабатичної ізоляції немає, тобто для неізолюваних систем.

Розглянемо систему в термостаті з температурами $T_1, T_2, T_3, \dots$. Нехай деяка система C виконує довільний круговий процес і отримує від цих термостатів кількості теплоти $Q_1, Q_2, Q_3, \dots$. Відзначимо, що разом систему і термостат, з яким вона в даний момент взаємодіє, ми вважаємо *неізолюваною системою*, а всю сукупність термостатів разом із системою C розглядаємо як *систему ізолювану*. В результаті, коли під час взаємодії системи C з будь-яким із термостатів мав місце нестатичний процес, то ентропія всієї системи в цілому (всі

термостати плюс система C) повинна зрости. Але оскільки система C повертається в початковий стан, то її ентропія не змінюється. Тому повинна зрости сума ентропій всіх термостатів. Якщо ΔS_i - зміна ентропії i -го термостата, то для суми ентропій можна написати:

$$\sum \Delta S_i > 0, \quad (30.1)$$

де символ $\sum$ означає, що сумування виконується за всіма термостатами, а система C здійснює круговий процес.

Як було зазначено в попередньому параграфі, зміна ентропії термостата не залежить від того, чи був процес теплообміну квазістатичним чи нестатичним. Тому для зміни ентропії i -го термостата можна написати:

$$\Delta S_i = -\frac{Q_i}{T_i}, \quad (30.2)$$

де Q_i - тепло, що передане (в алгебраїчному розумінні) i -тим термостатом системи C .

Якщо підставити це співвідношення в (30.1), то отримаємо:

$$\sum \frac{Q_i}{T_i} < 0. \quad (30.3)$$

Це і є *нерівність Клаузіуса*, яка виражає другий закон термодинаміки для нестатичних процесів у випадку неізолюваних систем. Необхідно зазначити, що в тому випадку, коли під час теплообміну температури системи C і термостата не збігаються, то тоді в нерівності Клаузіуса під T_i треба розуміти температуру термостата. Якщо ж можна вважати, що під час процесу температура змінюється неперервно, то нерівність Клаузіуса можна записати у вигляді:

$$\oint \frac{\delta Q}{T} < 0. \quad (30.4)$$

З виразу (30.4) випливає, що інтеграл зведеної теплоти у будь-якому циклічному процесі не може бути додатною величиною. Образно можна сказати, що нерівність Клаузіуса математичною мовою виражає той факт, що теплові машини, як і все у цьому світі, недосконалі.

Ця нерівність також може розглядатись як кількісне формулювання *другого закону термодинаміки*, хоча теж не найзагальніше. Вона стосується циклу, але не всі процеси у природі є

циклічними.

§31. Фізичні наслідки другого закону термодинаміки. Поняття про вічний двигун другого роду

Доведемо, що другий закон термодинаміки накладає обмеження на можливі перетворення теплоти в роботу. Нехай є резервуар теплоти - нагрівник та теплова машина довільної конструкції, яка може перетворювати теплоту в роботу. Якщо машина отримує від нагрівника кількість теплоти Q_i , то *неможливо всю отриману кількість теплоти перетворити в роботу*. Доведемо це, користуючись методом від супротивного. Тобто, припустимо, що всю кількість теплоти, отриману від нагрівника, теплова машина перетворила в роботу. Розглянемо тоді нагрівник, машину та об'єкт, над яким виконується робота, як ізольовану систему. Зрозуміло, що завдяки зробленому припущенню, інших тіл в ізольованій системі не повинно бути. Тоді, згідно із законом зростання ентропії, ентропія цієї ізольованої системи не повинна зменшитися, тобто

$$\Delta S \geq 0. \quad (31.1)$$

Завдяки адитивності ентропії, ΔS можна записати у вигляді:

$$\Delta S = \Delta S_H + \Delta S_M + \Delta S_{Ob}, \quad (31.2)$$

де ΔS_H , ΔS_M , ΔS_{Ob} - зміна ентропії нагрівника, машини та об'єкта відповідно.

Оскільки під час виконання роботи змінюється тільки механічний стан об'єкта (його, наприклад, піднімають), то $\Delta S_{Ob} = 0$.

Нехай під час одержання теплоти Q_1 машина зробила ціле число замкнутих процесів. В зв'язку з тим, що ентропія - функція стану, а стан системи тоді не змінився (машина повернулась в початковий стан), то $\Delta S_M = 0$. Тоді з (31.2) випливає, що

$$\Delta S = \Delta S_H,$$

а це означає, що

$$\Delta S_H \geq 0. \quad (31.3)$$

Але, з іншого боку, нагрівник віддає теплоту і його ентропія зменшується, тобто

$$\Delta S_H \leq 0. \quad (31.4)$$

Видно, що вирази (31.3) та (31.4) протирічать один одному. Отже, причина цього протиріччя в припущенні про можливість повного перетворення всієї отриманої кількості теплоти в роботу. Таким чином, *неможливо здійснити замкнутий процес, в якому*

система одержала б певну кількість теплоти і повністю перетворила б її в роботу (рис. 29).

Пристрій, який здійснює замкнуті процеси і всю отриману кількість теплоти перетворює в роботу, називається *вічним двигуном другого роду*. Тому другий закон термодинаміки для замкнутих процесів можна сформулювати так: *вічний двигун другого роду створити неможливо*.

Зауваження: розглянемо ще раз ту ж ізольовану систему. Для того, щоб машина могла перетворювати теплоту в роботу, необхідно до складу ізольованої системи включити ще і *холодильник*, якому система повинна передавати кількість теплоти Q_2 . Тоді робота W , що виконана системою, визначатиметься виразом:

$$W = Q_1 - Q_2. \quad (31.5)$$

З цього випливає, що будь-яка теплова машина повинна мати три компоненти (рис. 30):

- нагрівник;
- робоче тіло (газ);
- холодильник.

Справа в тому, що для того, щоб машина здійснила робочий цикл, необхідно, щоб робоче тіло (газ) повернулось у початковий стан. Для виграшу в роботі треба, щоб процес стиснення газу відбувався за нижчого тиску. Це уявляється можливим тоді, коли температура газу зменшиться, тобто коли газ, як робоче тіло, віддасть певну кількість теплоти холодильнику.

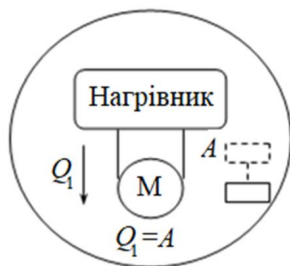


Рис. 29

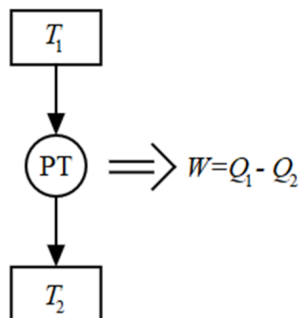


Рис. 30

Лекція 10. КОЛОВІ ПРОЦЕСИ (ЦИКЛИ) ТА ЇХ ОСОБЛИВОСТІ

§32. Цикл Карно.

§33. Цикл Карно в координатах TS.

§34. Основна термодинамічна тотожність.

§35. Максимальна робота процесу.

§36. Критика теорії теплової смерті Всесвіту.

[2. §2.5, §2.6; 4. §12, §21, §25; 6. §24, §29, §30, §36, §37; 7. §15, §16; 8. §III.6]

§32. Цикл Карно

Такий круговий процес, що складається з двох ізотермічних процесів та двох адіабатичних, отримав назву *циклу Карно*. Коефіцієнт корисної дії циклу Карно описується виразом:

$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1}. \quad (32.1)$$

Карно показав, що навіть в ідеальних умовах не може бути такої періодично діючої машини, яка дістаючи теплоту від нагрівника, повністю перетворила б її в механічну роботу - обов'язково частина цієї теплоти передається холодильнику.

Холодильником тут називається тіло, яке має значно нижчу температуру, ніж нагрівник, і яке повинно приводитися в контакт з робочим тілом машини.

Розглянемо докладніше цикл Карно. Робочим, тілом у машині Карно є ідеальний газ.

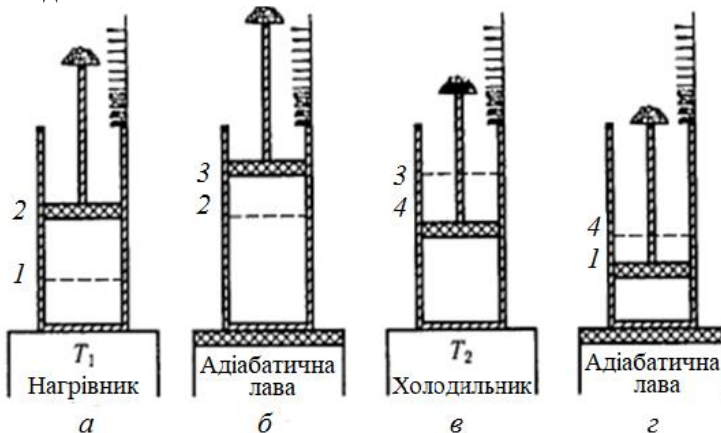


Рис. 31

Цикл здійснюється в циліндрі стінки і поршень якого нетеплопровідні, дно циліндра теплопровідне. Саме через дно циліндра газ приводиться в тепловий контакт з нагрівником і холодильником (рис. 31). Останні є тілами дуже великої теплоємності,

тому під час циклу їх температура залишається сталою: нагрівника - T_1 , холодильника - T_2 . Дно циліндра можна зробити нетеплопровідним, поставивши циліндр на так звану адіабатичну лаву.

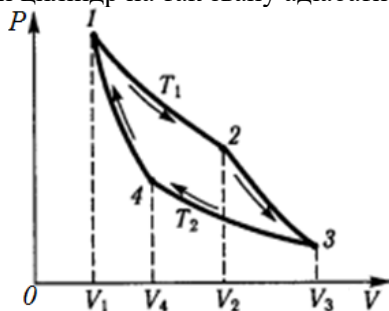


Рис. 32.

Цикл Карно складається з 2-х ізотермічних і двох адіабатичних процесів ідеального газу (рис. 32).

На ділянці 1-2 відбувається ізотермічне розширення газу. У цьому випадку циліндр у контакті з нагрівником T_1 , з поршня піщинки переносяться на полиці (рис. 31, а). Газ виконує роботу за рахунок теплоти Q_1 , яку він, дістає від нагрівника (умови ідеальні), на цій ділянці вся теплота перетворюється в механічну роботу.

На ділянці 2-3 відбувається адіабатичне розширення газу. Циліндр стоїть на адіабатичній лаві, піщинки переносяться з поршня на полиці (рис. 31, б). Газ - виконує роботу за рахунок внутрішньої енергії, тому в кінці охолоджується до температури T_2 .

На ділянці 3-4 здійснюється ізотермічне стиснення газу. Циліндр у контакті з холодильником T_2 , піщинки переносяться з полиць на поршень (рис. 31, в). Робота виконується газом, газ передає кількість теплоти Q_2 холодильнику, тому температура газу залишається незмінною - T_2 .

На ділянці 4-1 здійснюється адіабатичне стиснення газу. Циліндр - на адіабатичній лаві, піщинки переносяться з полиць на поршень (рис. 31, г). Робота виконується над газом, за рахунок неї внутрішня енергія газу збільшується, температура газу підвищилась від T_2 до T_1 . Газ переходить у початковий стан. Як бачимо робота виконана газом на ділянках 1-2 і 2-3, більша від роботи затраченої на стиснення газу на ділянці 3-4 і 4-1, на величину площі циклу. Теплоти забрано від нагрівника більше, ніж віддано холодильнику. Різниця $Q_1 - Q_2$ визначає ту кількість теплоти, яка перетворилася в роботу

циклу. Ознакою цієї роботи є тиск, що залишився на полицях над поршнем.

Аналогічно можна, здійснити цикл Карно у зворотному напрямі: $1-4-3-2-1$. В результаті від холодильника було б забрано теплоти Q_2 , а передано нагрівнику Q_1 ($Q_1 > Q_2$). За рахунок роботи виконаної газом, нагрівник дістав би теплоти на $Q_1 - Q_2$ більше ніж забрано від холодильника. Отже, можна передавати теплоту також від холодного до гарячого тіла, але для цього треба виконати певну роботу. На цьому ґрунтується робота холодильної машини.

Цикл Карно є оборотним, тобто складається з оборотних процесів.

§33. Цикл Карно в координатах TS

Якщо на осях координат відкласти абсолютну температуру T та ентропію S , то цикл Карно в таких координатах буде зображатись у вигляді прямокутника: двох ізотерм та двох адіабат. На рисунку 33 зображено Цикл Карно в координатах TS .

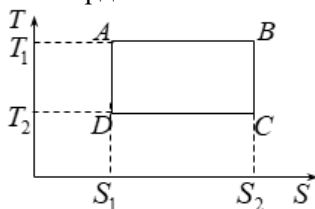


Рис. 33

Відмітимо, що в той час як на PV -площині форма циклу залежить від сорту газу і, зокрема, різна для реальних та ідеальних газів. Цикл Карно в координатах TS має універсальну форму і для будь-яких термодинамічних систем представляє собою прямокутник, сторони якого паралельні відповідним координатним осям.

Обрахуємо коефіцієнт корисної дії циклу Карно (оборотного) згідно формули

$$Q_T = \int_{S_1}^{S_2} T dS = T(S_2 - S_1). \quad (33.1)$$

Маємо

$$Q_1 = T_1(S_2 - S_1), \quad (33.2)$$

$$Q_2 = T_2(S_1 - S_2). \quad (33.3)$$

Звідки

$$\eta = \frac{Q_1 - |Q_2|}{Q_1} = \frac{T_1 - T_2}{T_1}. \quad (33.4)$$

Із формули (33.4) витікають наслідки:

1. Коефіцієнт корисної дії циклу Карно не залежить від вибору робочої речовини.

2. Коефіцієнт корисної дії залежить від відношення температур нагрівника і холодильника і не залежить від деталей конструкції теплової машини. Чим менше відношення $\frac{T_2}{T_1}$, тим більший коефіцієнт корисної дії циклу Карно.

3. Коефіцієнт корисної дії циклу Карно завжди менший одиниці тільки в тому випадку, якщо температура холодильника наближається до абсолютного нуля.

§34. Основна термодинамічна тотожність

У попередніх параграфах ми отримали математичні вирази для другого закону термодинаміки як для квазістатичних процесів

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad (34.1)$$

так і для нестатичних:

$$dS > \frac{\delta Q}{T}. \quad (34.2)$$

Математичний вираз для першого закону термодинаміки має вигляд:

$$dU = \delta Q - \delta W. \quad (34.3)$$

Нагадаємо, що ця формула справедлива як для квазістатичних процесів, так і для нестатичних, оскільки перший закон термодинаміки відображає закон збереження та перетворення енергії.

Якщо з (34.1) виразити δQ і підставити його в (34.3), то отримаємо співвідношення:

$$dU = TdS - \delta W. \quad (34.4)$$

Цей вираз навівають *основною термодинамічною тотожністю*, оскільки він має значно ширший зміст, ніж (34.3), оскільки в ньому вже введено поняття ентропії та температури. Крім того, з нього можна отримати співвідношення для багатьох термодинамічних функцій.

§35. Максимальна робота процесу

Співвідношення (34.1) і (34.2) зручно записати так:

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T}, \quad (35.1)$$

де знак нерівності відповідає нестатичним процесам, а рівність - квазістатичним. Якщо в цю формулу підставити значення δQ із (34.3), то для роботи δW отримаємо співвідношення:

$$\begin{aligned} \delta Q &= dU + \delta W; \\ \delta Q &\leq TdS; \\ dU + \delta W &\leq TdS; \\ \delta W &\leq TdS - dU, \end{aligned} \quad (35.2)$$

де, як і раніше, знак нерівності відповідає нестатичним процесам, а рівність - квазістатичним.

З виразу (35.2) видно, що в нестатичних процесах виконується менша робота, ніж в квазістатичних. Тобто, чим в більшій мірі процес буде наближатись до квазістатичного, тим більшою буде величина роботи, яка виконується. Це положення отримало назву принципу максимальної роботи в квазістатичних (оборотних) процесах.

§36. Критика теорії теплової смерті Всесвіту

Згідно закону зростання ентропії слідує, якщо в початковий момент часу ізолювана система перебувала в не рівноважному стані, то найбільш ймовірним результатом, в наступний момент часу, буде перехід в більш рівноважний стан з більшою ентропією. Отже, вважаючи Всесвіт ізолюваною системою можна повторити висновок, зроблений Р. Клаузіусом в 1865 році, що Всесвіт прямує до стану термодинамічної рівноваги, тобто прямує до стану, в якому зникнуть будь-які теплові потоки інтенсивних величин, зникне життя.

Критику цієї теорії дав Ф. Енгельс в «Діалектиці природи». Критика Ф. Енгельса базується на тому, що Всесвіт не можна вважати ізолюваною системою і не можна застосовувати закон збереження ентропії.

«Випромінювана в світловий простір теплота повинна мати можливість будь-яким шляхом, - шляхом, встановлення якого буде колись в майбутньому задачею природознавства, - перетвориться в другу форму руху, в якій вона може знову зосередитись і почати активно функціонувати».

«... вічно повторювана послідовна зміна світів в нескінченному

часі є тільки логічним доповненням до одночасного співіснування нескінченних світів в нескінченному просторі. Ось вічний кругообіг, в якому рух матерії, - кругообіг, який закінчує свій шлях лише в такі проміжки часу, для яких наш земний рік уже не може служити достатньою одиницею вимірювання: кругообіг, в якому час найвищого розвитку, час органічного життя і тим більший час життя істот, що усвідомлюють себе та природу. Відмірено дуже скудно, як і той простір, в межах якого існує життя та самосвідомість; кругообіг, в якому кінцева форма існування матерії безмежна, Сонце або туманність, окрема тварина або тваринний вид, хімічне з'єднання або розкладання - однаково проходить, і в якому ніщо не вічно, крім вічно змінної, вічно рухомої матерії і законів її руху та зміни. Але якби частина і якби безжалісно не здійснювався в часі й у просторі цей кругообіг; оскільки мільйонів Сонців і Земель не виникало та не зникало; якби довго не продовжувався час, хоч в якій-небудь сонячній системі, і тільки на одній планеті утворилися умови для органічного життя; скільки б безмежних органічних істот не повинно було раніше виникнути і заснути, попередньо ніж їх середовища розвинуться тварини зі здібними до мислення мозку, находячи на короткий час притулок для свого життя умови, щоб потім бути теж знищеними без милосердя, - і у нас є впевненість в тому, що матерія у всіх своїх перетвореннях залишається вічно однією і тією ж, що ні один із її атрибутів ніколи не може бути втрачений ...».

Лекція 11. ТЕРМОДИНАМІКА ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ

§37. Принцип дії теплових двигунів, холодильних машин та теплових насосів.

§38. Поршневі двигуни внутрішнього згорання.

§39. Цикл Отто.

§40. Цикл Дизеля.

§41. Цикл Трінклера.

[4. §22, §23; 6. §31-§35]

§37. Принцип дії теплових двигунів, холодильних машин та теплових насосів

За своїм призначенням теплові машини поділяються на три основні типи: теплові двигуни, теплові насоси та холодильні машини.



Рис. 34

Теплова машина трансформує теплоту в роботу. Робоче тіло здійснює прямий цикл, під час відтворення якого точка проходить на термодинамічній діаграмі проміжні стани робочого тіла за годинниковою стрілкою. В теплових машинах під час виконання роботи теплота від більш нагрітого тіла - нагрівника через робоче тіло передається більш холодному тілу - холодильнику (рис. 34).

Термічний ККД теплової машини є відношення роботи, яку дістали в результаті здійснення прямого оборотного циклу, до теплоти, підведеної до робочого тіла від нагрівника, тобто

$$\eta_T = \frac{W}{Q_1} = \frac{Q_1 - |Q_2|}{Q_1}. \quad (37.1)$$

Теплові насоси за рахунок виконаної роботи та теплоти, що відбирається з середовища (з меншою температурою), нагрівають тіла, які мають вищу температуру. Йдеться про перетворення теплоти нижчого потенціалу з температурою T_2 в теплоту вищого потенціалу з температурою T_1 ($T_2 < T_1$) і про передачу її споживачеві. Теплові насоси можуть знайти широке застосування для потреб опалення тоді, коли є джерело теплоти з порівняно низькою температурою. Це, наприклад, вода, що утворюється після охолодження гідроенергетиків; вода в різних водоймищах; відпрацьована технічна водяна пара. Робота теплового насоса полягає в тому, що за рахунок теплоти джерела з низькою температурою T_2 ($T_2 < T_1$) у випадку 1 (рис. 35) випаровується робоче тіло з низькою температурою кипіння (аміак, фреон).

Утворена пара надходить до компресора 3, в якому температура робочого тіла підвищується від T_2 до T_1 . Внаслідок зовнішньої роботи W компресор здійснює стиснення робочої речовини.

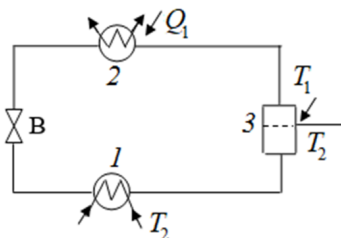


Рис. 35

Потім утворена пара з температурою T_1 надходить у конденсатор 2, де в процесі конденсації віддає теплоту рідині, що циркулює в опалювальній системі. Утворений конденсат робочого тіла надходить у дросельний вентиль B , в якому дроселюється з пониженням тиску від P_1 до P_2 . Після дросельного вентеля робоче тіло у вигляді рідини знову потрапляє у випарник 1.

Ефективність дії теплового насоса оцінюється коефіцієнтом перетворення

$$\varphi = \frac{Q_1}{W}. \quad (37.2)$$

Якби тепловий насос працював за оберненим Циклом Карно, то

$$\varphi = \frac{Q_1}{W} = \frac{T_1}{T_1 - T_2}. \quad (37.3)$$

Холодильною називають машину, яка за рахунок зовнішньої роботи здійснює передачу теплоти від тіла з нижчою температурою T_2 до тіла з вищою температурою T_1 . У холодильних машинах під час виконання зовнішньої роботи теплота від тіла, що охолоджується, передається в навколишнє середовище (рис. 36).



Рис. 36

Величина роботи визначається виразом: $W = Q_1 - |Q_2|$. Ефективність дії холодильної машини визначається *холодильним*

коефіцієнтом, який вимірюється відношенням теплоти, відведеної в оберненому циклі від робочого тіла до виконаної зовнішньої роботи:

$$\varepsilon = \frac{Q_2}{W}. \quad (37.4)$$

Холодильні машини за типом роботи тіл поділяються на газові та парові.

§38. Поршневі двигуни внутрішнього згорання

Поршневі двигуни внутрішнього згорання застосовуються у народному господарстві. *Двигун внутрішнього згорання* - теплова машина, в якій паливо спалюється безпосередньо в циліндрі під поршнем. Теплота у цьому випадку перетворюється в роботу за допомогою поршня та шатунно-кривошипного механізму. Циліндр має два отвори з клапанами, через один з яких здійснюється всмоктування робочого тіла (повітря або паливної суміші), а через інший - вихлоп робочого тіла після завершення циклу. Сучасні поршневі двигуни внутрішнього згорання поділяються на три групи: із згоранням палива для $V = \text{const}$ (*цикл Отто*); із згоранням палива для $P = \text{const}$ (*цикл Дизеля*); із змішаним згоранням палива частково для $V = \text{const}$ і потім для $P = \text{const}$ (*цикл Трінклера*).

§39. Цикл Отто

Цикл Отто було здійснено у 1876 році. Поршень в циліндрі двигуна протягом одного циклу Отто здійснює чотири ходи або такти: всмоктування; стиск; розширення після згорання суміші, тобто робочий хід; випуск і виштовхування продуктів згорання в атмосферу. За один такт поршень здійснює хід від крайнього одного положення, наприклад, верхнього, що називається *верхньою мертвою точкою*, до другого - *нижньої мертвої точки*.

Проведемо термодинамічний аналіз ідеалізованого циклу Отто (рис. 37). Робочим тілом у двигуні Отто є повітря, змішане з певною масою парів бензину або іншого палива. Наливна суміш готується в карбюраторі.

В кінці другого такту, тобто стиску, паливна суміш запалюється від електричної іскри. За робоче тіло беремо ідеальний газ із сталою теплоємністю. Циліндр заповнено постійною масою робочого тіла. Між нагрівником і робочим тілом існує ідеальний тепловий контакт. Підведення теплоти до робочого тіла здійснюється через нагрівник, не внаслідок спалювання палива. Такі самі умови створюються і

відносно відведення теплоти. Розглянемо цикл Отто.

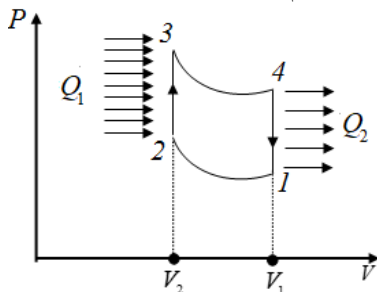


Рис. 37

Перший такт - адіабатичний стиск (1-2); другий такт (2-3) - по ізохорі робочому тілу надається кількість теплоти Q_1 ; третій такт - адіабатичне розширення або робочий хід (3-4); четвертий такт - по ізохорі (4-1), у якому робоче тіло повертається в початковий стан, тоді відводиться кількість теплоти Q_2 .

Термічний ККД циклу Отто η_T виражається такою формулою:

$$\eta_T = 1 - \frac{1}{\beta^{\gamma-1}}, \quad (39.1)$$

де $\beta = \frac{V_1}{V_2}$ - ступінь стиску.

Згідно виразу (39.1), η_T - залежить від ступеня стиску, який в свою чергу залежить від якостей палива, показника адіабати γ . Більшому β відповідають і вищі значення η_T . Проте збільшення β обмежене самозайманням палива, що різко знижує економічність двигуна та приводить його руйнування. Ступінь стиску в звичайних карбюраторних двигунах не перевищує 7-12.

§40. Цикл Дизеля

Розглянемо цикл Дизеля. Як видно з P -діаграми (рис. 38) цикл Дизеля складається з адіабати 1-2.

При цьому $\beta \approx 15 - 16$. Другий такт - ізобара 2-3. В кінці другого такту повітря має настільки високу температуру, що розпилені спеціальними пристроями важкі низькосортні види палива - нафта, мазут, соляри, масло тощо під час вприскування в циліндр займаються і, згоряючи зумовлюють переміщення поршня для $P = \text{const}$; процеси 2-3, 3-4 - адіабатне розширення продуктів горіння і повітря та 4-1 складають третій такт - робочий хід.

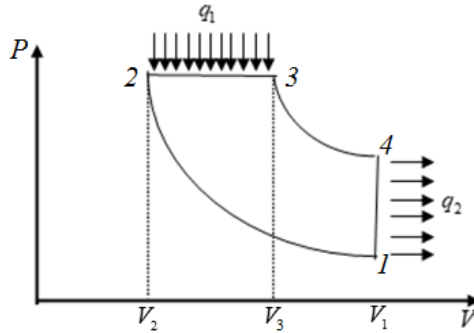


Рис. 38

Цикл Дизеля характеризується також параметром - *ступінь попереднього розширення* $\sigma = \frac{V_3}{V_1}$.

Його термічний ККД виражається формулою:

$$\eta_T = 1 - \frac{1}{\gamma} \frac{p^{\gamma-1}}{p - 1} \frac{1}{\beta^{\gamma-1}}. \quad (40.1)$$

Із збільшенням β і γ ККД збільшується, а за збільшення P - зменшується. В порівнянні циклів Отто і Дизеля видно, що у них однакові ККД і досягають 35%, у цьому випадку слід додати, що двигун Дизеля не потребує карбюрування палива.

§41. Цикл Трінклера

У двигуні, що працює за циклом Трінклера, немає пристрою для розпилення палива. Розпилення здійснюється в спеціальній форкамері, розміщеній у верхній частині циліндра, з'єднаній з робочим циліндром одним або декількома вузькими каналами.

У робочому циліндрі повітря адіабатично стискується, (нагріваючись до температури, що забезпечує займання рідкого палива, яке насосом подається до форкамери і розпилюється у вигляді дрібних капель (10-15 мкм). Частина палива у цьому випадку швидко згоряє в форкамері для $V = \text{const}$. Різке зростання тиску тоді призводить до виштовхування в робочий циліндр суміші палива, яке не згоріло. Догоряє паливо в циліндрі за умови $P = \text{const}$. Після повного згорання палива даліше розширення продуктів згорання (робочий хід) відбувається адіабатично. Потім відпрацьовані гази виштовхуються з циліндра в атмосферу.

Лекція 12. ТЕМПЕРАТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ ФІЗИЧНИХ СИСТЕМ

§42. Поняття температури.

§43. Відносні температурні шкали.

§44. Абсолютна температурна шкала.

§45. Статистична температура.

§46. Термодинамічна шкала температур

§47. Поняття про цінність внутрішньої енергії.

[1. §1.3, §5.1; 2. §2.1; 3. §23; 4. §3, §4, §16; 6. §38-§41; 7. §6, §22, §37; 8. §III.7]

§42. Поняття температури

Розглянемо деякі властивості стану термодинамічної рівноваги, які безпосередньо підводять до уявлення про температуру, як міру інтенсивності теплового руху.

Розглянемо дві системи, кожна з яких знаходиться в стані термодинамічної рівноваги і встановимо між ними тепловий контакт. Тоді буде мати місце один з двох можливих випадків:

1) після встановлення теплового контакту стан термодинамічної рівноваги в системах не порушується - в цьому випадку кажуть, що системи знаходяться в тепловій або термодинамічній рівновазі між собою;

2) встановлення теплового контакту приводить до порушення термодинамічної рівноваги в системах, але через деякий час і в цьому випадку обидві системи придуть до стану термодинамічної рівноваги.

У термодинаміці приймають як дослідний факт ту обставину, що після встановлення термодинамічної рівноваги в системах, розрив теплового контакту, як і його відновлення, непризводить до порушення стану термодинамічної рівноваги в кожній із підсистем. Цей факт має надзвичайно важливе значення, оскільки з нього випливає те, що тепловий контакт лише створює умови для того, щоб встановилась термодинамічна рівновага, властивості ж систем у рівновазі визначаються виключно станом теплового руху всередині самої системи.

Розглянемо деякі макроскопічні системи A , B , C (рис. 39). Нехай системи A та B , кожна окремо, знаходяться в рівновазі з системою C . Звідси випливає, що у випадку встановленні теплового

контакту між системами A та B , рівновага між ними не порушиться.

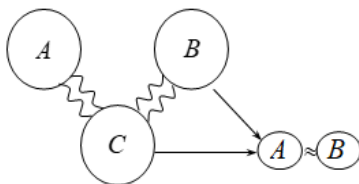


Рис. 39

Ця важлива властивість станів термодинамічної рівноваги називається *транзитивністю*. Властивість транзитивності станів в принципі дає можливість порівнювати стани теплового руху в різних системах, не приводячи їх в стан безпосередньої взаємодії між собою, а використовуючи для цього систему C . Звідси і випливає уявлення про температуру.

§43. Відносні температурні шкали

Виберемо деяке тіло, наприклад, ту ж саму систему C як систему, з допомогою якої будемо порівнювати стани теплового руху в різних тілах. Розглянемо будь-який параметр, що характеризує цю систему і залежить від стану теплового руху в ній, наприклад, об'єм, електричний опір тощо. Яке-небудь значення цього параметра приймемо за «нормальне», наприклад, те означення, коли система C перебуває у рівновазі з льодом, що розтає (для нормального тиску). Позначимо його як l_0 . Значення цього ж параметра, коли система C перебуває в рівновазі з параметрами води, що кипить (для нормального тиску), її позначимо через l_{100} . Якщо в якому-небудь іншому стані цей же параметр приймає значення l , то згідно з означенням, система має в цьому стані температуру

$$t = \frac{l - l_0}{l_{100} - l_0} \cdot 100 \text{ (}^\circ\text{C)}. \quad (43.1)$$

Тоді температура буде вимірюватись в градусах Цельсія ($^\circ\text{C}$).

Проградувана таким способом система називається *термометром*, а розглянута температурна шкала називається *температурною шкалою Цельсія*. Зрозуміло, що введена таким чином температурна шкала є відносною температурною шкалою, оскільки покази термометра залежать як від вибору параметра, так і від вибору термометричної речовини. Тому можна побудувати багато різних відносних температурних шкал. Так, наприклад, відомим є

температурні шкали Реомюра та Фарангейта.

Шкала Фарангейта - така температурна шкала, в якій температурний інтервал між точками плавлення льоду і кипіння води (при нормальному атмосферному тиску) розділений на 180 частин - градусів Фарангейта ($^{\circ}\text{F}$), тоді точці плавлення льоду присвоєно 32°F , а точці кипіння води 212°F . Шкала Фарангейта була запропонована в 1724 році німецьким фізиком Д.Г. Фарангейтом і використовується в деяких країнах, зокрема в США. Перерахунок температури за шкалою Фарангейта в температуру за шкалою Цельсія виконується за формулою:

$$t_{\text{C}} = \frac{5}{9}(t_{\text{F}} - 32^{\circ}\text{F})l.$$

Шкала Реомюра - така температурна шкала, в якій температурний інтервал між точками плавлення льоду (0°R) і кипіння води (80°R) (при нормальному атмосферному тиску) розділений на 80 частин - градусів Реомюра ($^{\circ}\text{R}$). Тобто

$$1^{\circ}\text{R} = 1,25^{\circ}\text{C}.$$

Зауважимо, що шкала Реомюра нині практично не використовується.

Розглянемо тепер дві довільні системи A і B і приведемо по черзі кожен з них в контакт з термометром (системою C). Якщо в обох випадках термометр показав однакову температуру t_1 , то в силу транзитивності станів термодинамічної рівноваги можна стверджувати, що в разі здійснення теплового контакту між системами A та B рівновага не порушиться. Отже, згідно з означенням температури, *термодинамічна рівновага між різними системами під час їх теплового контакту можлива лише за однакових температур цих систем*. Зауважимо, що довільну макроскопічну систему завжди можна розглядати як сукупність певного числа підсистем. Тоді, наприклад, довільну малу (макроскопічних розмірів) частину даної рідини можна розглядати як систему, що перебуває в тепловому контакті з іншою частинкою тієї ж рідини. Тоді температури обох цих систем однакові. Таким чином, температура є тією характеристикою *макроскопічної системи*, яка не залежить від маси системи чи кількості частинок в ній, а визначається лише станом теплового руху в ній, а саме, його інтенсивністю. Нагадаємо, що такі величини називають *інтенсивними*. У цьому розумінні кажуть, що *температура є мірою інтенсивності теплового*

руху, тобто, різній інтенсивності теплового руху будуть відповідати різні значення температури. Підкреслимо, що побудована за вказаним принципом температурна шкала має *умовний характер* у тому розумінні, що покази термометра залежать від вибору параметра, за яким вимірюється температура, так і від вибору термометричної речовини. Тому на практиці доводиться користуватись якою-небудь стандартною шкалою, що пов'язана з конкретною речовиною.

§44. Абсолютна температурна шкала

Покажемо як другий закон термодинаміки дає можливість встановити *абсолютну шкалу температур*, що не залежить від властивостей термометричної речовини, ні від вибраного термометричного параметра (реперних точок). Температуру, що виміряна за такою температурною шкалою, називають *абсолютною температурою*. Зауважимо, що саме абсолютна температурна шкала найбільшою мірою відповідає означенню температури як міри інтенсивності теплового руху в тому розумінні, що нуль за такою абсолютною температурною шкалою повинен відповідати повному спокою в фізичній системі (з класичної точки зору зрозуміло).

Для виведення основного співвідношення, яке визначає абсолютну температуру, розглянемо дві системи з внутрішніми енергіями U_1 та U_2 , що знаходяться в стані термодинамічної рівноваги між собою. Тоді ці дві системи утворюють ізольовану систему. Через те, що в системі реалізовано стан термодинамічної рівноваги, то ентропія такої ізольованої системи буде максимальною, тобто, набуватиме найбільшого значення для даної внутрішньої енергії U ізольованої системи. Зрозуміло, що в силу адитивності

$$U = U_1 + U_2. \quad (44.1)$$

Оскільки ентропія теж є адитивною величиною, то для повної ентропії ізольованої системи можна записати:

$$S = S_1(U_1) + S_2(U_2). \quad (44.2)$$

У зв'язку із тим, що внутрішня енергія U всієї ізольованої системи згідно з виразом (44.1) є величиною сталою, то з цієї формули можна знайти одну з невідомих величин, наприклад U_1 :

$$U_1 = U - U_2. \quad (44.3)$$

Підставивши вираз (44.3) у формулу (44.2), можна стверджувати, що ентропія всієї системи S залежить тільки від одного невідомого аргументу - від U_2 . Тобто можна записати, що

$$S = S(U_2) = S_1(U_1(U_2)) + S_2(U_2). \quad (44.4)$$

Візьмемо тепер похідну за змінною U_2 від обох частин цієї рівності (зрозуміло, що мова йде про таку похідну, в якій не враховано залежність ентропії S від зовнішніх параметрів):

$$\frac{dS}{dU_2} = \frac{\partial S_1}{\partial U_1} \cdot \frac{dU_1}{dU_2} + \frac{\partial S_2}{\partial U_2} = -\frac{\partial S_1}{\partial U_1} + \frac{\partial S_2}{\partial U_2}. \quad (44.5)$$

При запису цього виразу враховано, що $\frac{dU_1}{dU_2} = -1$ у відповідності із (44.3). Оскільки дана ізольована система перебуває в рівновазі, то в цьому стані її ентропія буде максимальною, тобто похідна (44.5) повинна дорівнювати нулю:

$$\frac{dS}{dU_2} = -\frac{\partial S_1}{\partial U_1} + \frac{\partial S_2}{\partial U_2} = 0. \quad (44.6)$$

Із виразу (44.6) слідує, що для двох систем, що перебувають в стані термодинамічної рівноваги:

$$\frac{\partial S_1}{\partial U_1} = \frac{\partial S_2}{\partial U_2}. \quad (44.7)$$

Співвідношення (44.7) можна узагальнити для довільного числа систем або довільного числа частинок однієї і тієї ж самої системи, що перебувають у рівновазі між собою, а саме похідна від ентропії за внутрішньою енергією для всіх частин системи однакова, тобто постійна вздовж всієї системи. Цю похідну можна вважати деякою *характеристикою рівноважної мікроскопічної системи*, яка не залежить ні від вибору термометричної речовини, ні від вибору параметра, за означенням якого порівнюються стани термодинамічної рівноваги. Величину обернену до цієї похідної називають *абсолютною температурою*

$$\frac{\partial S_1}{\partial U_1} = \frac{\partial S_2}{\partial U_2} = \dots = \frac{\partial S_n}{\partial U_n} = \frac{1}{T}. \quad (44.8)$$

Відзначимо, що абсолютна температура як і ентропія системи є чисто статистичною величиною і має зміст лише в застосуванні до рівноважних макроскопічних систем. Отже, з співвідношення (44.8) слідує, що абсолютні температури системи, які перебувають в рівновазі однакові:

$$T_1 = T_2. \quad (44.9)$$

Оскільки ентропія - це величина, що має чисто статистичний характер, то очевидно, що температура носить теж статистичний характер (абсолютна). Це поняття можна ввести лише для:

- 1) системи, що складається з великого числа частинок;

2) систем, які перебувають в стані теплової рівноваги.

Розглянемо тепер дві підсистеми, які утворюють разом ізольовану систему, але не перебувають в рівновазі між собою. Тобто, ці підсистеми мають різні абсолютні температури T_1 і T_2 . Якщо їх привести в контакт між собою, то з часом їх температури почнуть вирівнюватися та ізольована система прямуватиме до стану термодинамічної рівноваги. У цьому процесі ентропія ізольованої системи $S = S_1 + S_2$ буде зростати, тобто, похідна від ентропії ізольованої системи за часом буде додатною:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS_1}{dt} + \frac{dS_2}{dt} = \frac{dS_1}{dU_1} \cdot \frac{dU_1}{dt} + \frac{dS_2}{dU_2} \cdot \frac{dU_2}{dt} > 0. \quad (44.10)$$

При цьому внутрішня енергія ізольованої системи не змінюється, тобто,

$$\frac{dU_1}{dt} + \frac{dU_2}{dt} = 0. \quad (44.11)$$

Звідси знаходимо:

$$\frac{dU_2}{dt} = -\frac{dU_1}{dt}. \quad (44.12)$$

Підставляючи вираз (44.12) у формулу (44.10), отримуємо:

$$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{dS_1}{dU_1} - \frac{dS_2}{dU_2} \right) \frac{dU_1}{dt} = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \frac{dU_1}{dt} > 0. \quad (44.13)$$

Проаналізуємо, за яких умов може виконуватись це співвідношення. Якщо $T_2 > T_1$, тобто, температура другої підсистеми більша за температуру першої підсистеми, то для того, щоб отримана нерівність була правильною, необхідно виконання умови

$$\frac{dU_1}{dt} > 0. \quad (44.14)$$

Це співвідношення означає, що внутрішня енергія першої підсистеми збільшується, а значить другої - зменшується. Тобто, для контакту двох систем з різними температурами *енергія переходить від системи з більшою температурою до системи з меншою температурою*. Це одна з важливих властивостей температури.

Зауваження: саме з цією властивістю пов'язується спосіб введення абсолютної температури, коли похідну від ентропії системи за її внутрішньою енергією прирівнюють до $f(T) = \frac{1}{T}$, а не до абсолютної температури T .

Крім того, варто відзначити, що ентропія є зростаючою функцією внутрішньої енергії, тобто, $\frac{\partial S}{\partial U} > 0$ (дійсно, оскільки

$S = k \ln W$, то за зростання числа частинок буде зростати число W можливих мікростанів системи та її ентропія, а в силу адитивності буде зростати і внутрішня енергія системи). Це означає, що абсолютна температура системи є завжди величиною додатною ($T > 0$).

§45. Статистична температура

Сформулюємо тепер основні властивості абсолютної температури T і порівняємо їх з властивостями модуля канонічного розподілу θ . Тобто

1. Абсолютна температура T і модуль канонічного розподілу θ є величинами додатними ($T > 0$; $\theta > 0$).

2. Системи перебувають в рівновазі, тоді коли їх абсолютні температури однакові: $T_1 = T_2$, а також і тоді, коли модулі канонічних розподілів для цих систем однакові: $\theta_1 = \theta_2$.

3. Під час контакту двох систем із різними температурами енергія переходить від системи з більшою температурою до системи з меншою температурою ($T_1 < T_2$). Аналогічну властивість має і модуль канонічного розподілу ($\theta_1 < \theta_2$).

Ці та деякі інші властивості абсолютної температури і модуля канонічного розподілу, показують, що вказані величини ведуть себе надзвичайно подібно одна до одної, тому модуль канонічного розподілу називається ще *статистичною температурою* (аналогом абсолютної температури). Отже, ці величини прямопропорційні між собою

$$\theta = kT, \quad (45.1)$$

де k - це стала Больцмана ($k = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$).

Підкреслимо, що поняття статистичної температури можна застосовувати лише для макроскопічних систем, що містять дуже велике число частинок. Наприклад, не можна користуватись поняттям температури для опису систем, що містять кілька частинок або дуже мале їх число, оскільки в такій системі зіткнення між частинками будуть відбуватись надзвичайно рідко, обмін енергією між частинками буде утруднений, а значить стан термодинамічної рівноваги може і не встановитись в такій системі (та і взагалі кажучи, термодинамічні поняття не можна застосовувати для систем із малим числом частинок).

Таким чином, в курсі статистичної фізики поняття температури

розширюється і поглиблюється.

§46. Термодинамічна шкала температур

В 1848 році Вільям Томсон (лорд Кельвін) вказав, що теоремою Карно можна скористатись для побудови раціональної температурної шкали, дійсно незалежної від індивідуальних особливостей термометричної речовини і будови термометра.

Із теореми Карно слідує, що ККД циклу Карно може залежати тільки від температури нагрівника і холодильника. Позначимо буквами t_1 і t_2 емпіричні температури нагрівника й холодильника, що виміряні яким-небудь термометром (наприклад, газовим, ртутним, термометром опору і так далі). Тоді

$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = f(t_1, t_2), \quad (46.1)$$

де $f(t_1, t_2)$ - універсальна функція вибраних емпіричних температур.

Її вигляд дійсно не залежить від будови машини Карно і від роду використаної робочої речовини. Цими й обставинами і скористувався Вільям Томсон, який запропонував застосувати цикл Карно для побудови температурної шкали.

Щоб побудувати термодинамічну шкалу температур, введемо більш просту універсальну функцію температур t_1 і t_2 . Ця функція легко виражається через попередню функцію $f(t_1, t_2)$. Визначимо загальний вигляд функції $\varphi(t_1, t_2)$. З цією метою візьмемо три теплових резервуара, температури яких підтримуються постійними. Емпіричні температури цих резервуарів позначимо через t_1 і t_2 відповідно. Використовуючи їх в якості нагрівників і холодильників, проведемо три цикла Карно, зображених на рисунку 40. Передбачаємо, що t_1, t_2, t_3 - температури на ізотермах 12, 43, 65. Для циклів Карно 1234 і 4356 можна написати:

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \varphi(t_1, t_2), \quad \frac{Q_2}{Q_3} = \varphi(t_2, t_3).$$

Виключивши звідси теплоту Q_2 , отримаємо:

$$\frac{Q_1}{Q_3} = \varphi(t_1, t_2)\varphi(t_2, t_3).$$

Але ці два цикли, з'єднані разом за схемою рисунку 40, еквівалентні одному циклу Карно 1-2-5-6. Це відбувається через те, що по ізотермі 4-3 проходить дві адіабати в протилежних напрямках і вона може бути виключена із розгляду.

Відповідно:

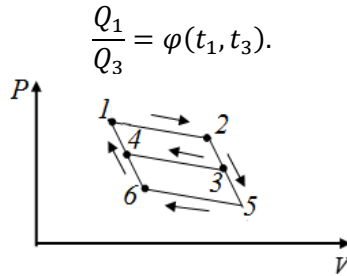


Рис. 40

Порівнюючи це співвідношення з попереднім, отримаємо:

$$\varphi(t_1, t_2)\varphi(t_2, t_3) = \varphi(t_1, t_3). \quad (46.2)$$

Звідки

$$\varphi(t_1, t_2) = \frac{\varphi(t_1, t_3)}{\varphi(t_2, t_3)} \quad (46.3)$$

або

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{\varphi(t_1, t_3)}{\varphi(t_2, t_3)}. \quad (46.4)$$

Таке співвідношення справедливе і для будь-якого значення аргументу t_3 , адже його ліва частина не залежить від значення температури. Тоді і співвідношення в правій частині не може змінюватись із зміною t_3 . Можна фіксувати t_3 , не змінюючи значення самого відношення, але тоді чисельник в правій частині формули (46.4) буде функцією одного тільки аргументу t_1 . Позначимо цю функцію через $\theta(t_1)$. Знаменник буде також функцією від аргументу t_2 . Звідки

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{\theta(t_1)}{\theta(t_2)}. \quad (46.5)$$

Таким чином, $\varphi(t_1, t_2)$ є відношення значень однієї і тієї ж функції $\theta(t)$ для $t = t_1$ і $t = t_2$. Так як величина $\theta(t)$ залежить тільки від температури, то вона сама може бути прийнята за міру температури тіла. Величину $\theta(t)$ називають *абсолютною термодинамічною температурою*. Відношення двох термодинамічних температур $\theta_1 \equiv \theta(t_1)$ і $\theta_2 \equiv \theta(t_2)$ визначається співвідношенням:

$$\frac{\theta_1}{\theta_2} = \frac{Q_1}{Q_2}. \quad (46.6)$$

Відношення $\frac{\theta_1}{\theta_2}$ в принципі може бути знайдено експериментально. Для цього треба виміряти теплоти Q_1 і Q_2 . Однак значення цього відношення саме температури θ_1 і θ_2 ще не визначені однозначно. Це видно також із того, що функція $\theta(t) = \varphi(t_1, t_3)$ залежить від параметра, якому можна надати довільне значення. Це буде нескінченна множина температурних шкал.

Щоб однозначно визначити термодинамічну температуру θ поступимо так: візьмемо дві постійні температурні точки, наприклад, нормальну точку плавлення льоду і нормальну точку кипіння води. Позначимо термодинамічні температури цих точок θ_n і θ_k , а відповідні їм кількості теплоти в циклі Карно - Q_n і Q_k . Фіксуємо далі значення різниці $\theta_k - \theta_n$, наприклад, приймемо, що вона дорівнює 100 градусів. Тоді температурний інтервал між нормальними точками плавлення льоду і кипіння води розділиться на 100 рівних частин, кожна із яких раніше називалася градусом Кельвіна, а тепер - просто кельвіном. Із двох рівнянь

$$\frac{\theta_k}{\theta_n} = \frac{Q_k}{Q_n}, \theta_k - \theta_n = 100. \quad (46.7)$$

можна окремо визначити θ_n і θ_k . Для цього треба виміряти відношення $\frac{Q_k}{Q_n}$. Хоча ні в одному реальному досліді це не робилось, але шляхом непрямих вимірювань було знайдено:

$$\theta_n \approx 273,15 \text{ К}; \theta \approx 373,15 \text{ К}.$$

Термодинамічну температуру $\Delta S = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \Delta T = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \Delta V + \frac{1}{T} C_V \Delta T$ будь-якого тіла можна обчислити, наприклад, за формулою:

$$\frac{\theta}{\theta_n} = \frac{Q}{Q_n}, \quad (46.8)$$

якщо попередньо провести цикл Карно між даним тілом і танучим льодом та виміряти відповідні кількості теплот Q і Q_n . Побудована, таким чином, температурна шкала називається *абсолютною термодинамічною шкалою температур*.

§47. Поняття про цінність внутрішньої енергії

Зв'яжемо поняття ентропії з поняттям *цінності внутрішньої енергії*. Внутрішня енергія будь-якої системи цікавить нас перш за все з точки зору можливості перетворення її в роботу. Тому *будемо*

вважати більш цінною внутрішню енергію такої системи, в якій її можна в більшій мірі перетворити в роботу.

Розглянемо дві ізольовані підсистеми з різними температурами T_1 і T_2 та внутрішніми енергіями U_1 і U_2 (рис. 41). Будемо вважати їх разом як ізольовану систему A , що характеризується значенням внутрішньої енергії $U_A = U_1 + U_2$ та ентропією S_A .



Рис. 41

Приведемо ці підсистеми в контакт між собою і будемо вважати їх разом як ізольовану систему B , що характеризується значенням внутрішньої енергії $U_B = U_1 + U_2$ та ентропією S_B .

Видно, що внутрішні енергії обох систем однакові: $U_A = U_B$, а ентропія системи B більша за ентропію системи A , оскільки система A нерівноважна, а в системі B вже реалізувався стан термодинамічної рівноваги.

Зрозуміло, що внутрішню енергію нерівноважної системи A ще можна перетворити в роботу, якщо на її основі створити теплову машину, взявши за нагрівник підсистему з більшою температурою, а за холодильник - підсистему з меншою температурою. Тому внутрішня енергія системи A є більш цінною, ніж системи B . Отже, більш цінною буде внутрішня енергія тієї системи, ентропія якої менша ($S_A < S_B$).

Лекція 13. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ФУНКЦІЇ

§48. Термодинамічні характеристичні функції (внутрішня енергія, вільна енергія, термодинамічний потенціал Гіббса, ентальпія).

§49. Залежність термодинамічних потенціалів від числа частинок.

[1. §2.1, §2.2; 2. §2.3, §2.7, §2.10, §2.11; 3. §5, §6; 4. §24; 5. §5.1, §6.1; 6. §42, §43; 7. §12-§14; 8. §III.9, §III.10]

§48. Термодинамічні характеристичні функції (внутрішня енергія, вільна енергія, термодинамічний потенціал Гіббса, ентальпія)

Функціональний зв'язок між внутрішніми і зовнішніми параметрами системи - *рівняння стану*. Завдяки наявності рівняння стану число параметрів системи можна вибрати незалежним.

Виявляється, що для певного вибору незалежних параметрів системи завжди буде існувати функція, зміна, якої в елементарному процесі буде повним диференціалом. Отже, така функція буде функцією стану системи. Такі функції ми ще будемо називати *характеристичними* або *термодинамічними*, а також *термодинамічними потенціалами*. Практично всі знайденні характеристичні функції будуть мати такі властивості:

1. Всі вони будуть адитивними і однозначними функціями стану системи, тобто кожному стану буде відповідати характеристичне значення функції (однозначна).

2. Похідні від характеристичних функцій будуть давати невідомі параметри системи.

3. Зменшення термодинамічного потенціалу в багатьох випадках буде визначати роботу системи або над системою.

4. Більшість термодинамічних потенціалів будуть приймати екстремальне значення в стані термодинамічної рівноваги.

Найчастіше використовується п'ять функцій:

1. Внутрішня енергія - U .

2. Вільна енергія - F .

3. Термодинамічний потенціал Гіббса - Φ :

$$\Phi = U - TS + PV;$$

$$F = U - TS;$$

$$\Phi = F + PV.$$

4. Ентропія - S .

5. Ентальпія - H :

$$H = U + PV.$$

Адитивність та однозначність вільної енергії, термодинамічного потенціалу Гіббса і ентальпії слідує з адитивності та однозначності внутрішньої енергії та ентропії системи. Отримаємо вирази для всіх цих функцій. Будемо виходити з основної термодинамічної тотожності:

$$TdS = dU + \delta W. \quad (48.1)$$

Виділимо із роботи δW , роботу по розширенню газу:

$$\delta W = PdV + \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i, \quad (48.2)$$

де $\sum_{i=1}^{n'} A_i da_i$ - робота по зміні інших параметрів системи, крім сил тиску (наприклад, що зумовлена електричними, магнітними силами). Отже, основну термодинамічну тотожність можна записати у вигляді:

$$TdS = dU + PdV + \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.3)$$

Покажемо, що виходячи із цього співвідношення для певного вибору незалежних параметрів можна отримати всі названі нами характеристичні функції.

Внутрішня енергія.

Виберемо за незалежні змінні S, V, a . Покажемо, що для такого вибору незалежних змінних характеристичною функцією буде внутрішня енергія, тобто в елементарному процесі її зміна буде повним диференціалом. Дійсно переписавши вираз (48.3) у вигляді:

$$dU = TdS - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.4)$$

бачимо, що внутрішня енергія є характеристичною функцією.

Доведемо другу властивість характеристичної функції. Продиференціюємо внутрішню енергію як $U = U(S, V, a)$. Знаходимо:

$$dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS - \frac{\partial U}{\partial V} dV - \sum_{i=1}^{n'} \frac{\partial U}{\partial a_i} da_i. \quad (48.5)$$

Прирівнявши коефіцієнти біля диференціалів незалежних змінних в співвідношеннях (48.4) і (48.5), знаходимо:

$$\begin{aligned} T &= \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,a}; \\ P &= - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,a}; \\ A_i &= - \left(\frac{\partial U}{\partial a_i} \right)_{S,V}. \end{aligned} \quad (48.6)$$

Отже, дійсно похідні від U - внутрішньої енергії дають значення інших невідомих параметрів системи.

Приклад. Внутрішня енергія ідеального газу записана у вигляді:

$$U = \frac{3}{2} NkT$$

не є характеристичною функцією (так як тут вона не залежить від S, V, a).

Вільна енергія.

Розглянемо як незалежні змінні T, V, a і всю сукупність зовнішніх параметрів. Від правої і лівої частини співвідношення (48.4) відніmemo повний диференціал $d(TS)$:

$$d(U - TS) = TdS - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i - TdS - SdT. \quad (48.7)$$

Ввівши позначення:

$$F = U - TS, \quad (48.8)$$

де F - вільна енергія системи, знаходимо:

$$dF = -SdT - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.9)$$

Доведемо другу властивість, для цього знайдемо повний диференціал. Так як перша властивість доводиться зразу, а для другої знайдемо повний диференціал від вільної енергії:

$$F = F(T, V, a), \quad (48.10)$$

$$dF = -\frac{\partial F}{\partial T} dT - \frac{\partial F}{\partial V} dV + \sum_{i=1}^{n'} \frac{\partial F}{\partial a_i} da_i. \quad (48.11)$$

Прирівняємо коефіцієнти біля диференціалів незалежних змінних:

$$\begin{aligned} S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,a}; \\ P &= -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,a}; \\ A_i &= -\left(\frac{\partial F}{\partial a_i}\right)_{T,V}. \end{aligned} \quad (48.12)$$

Розглянемо ізотермо-ізохорний процес, коли $T = \text{const}$, $V = \text{const}$. Тоді

$$-(dF)_{T,V} = \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.13)$$

Тобто зменшення термодинамічного потенціалу дорівнює

роботі зовнішніх сил.

Термодинамічний потенціал Гіббса.

Виберемо за незалежні змінні P, T, a . Покажемо, що такому виборі відповідає термодинамічний потенціал Гіббса. Для цього до правої і лівої частин (48.9) додамо диференціал $d(PV)$.

$$d(F + PV) = -SdT - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + PdV + VdP. \quad (48.14)$$

Після скорочення підкреслених виразів і введення позначення

$$\Phi = F + PV, \quad (48.15)$$

де Φ - термодинамічний потенціал Гіббса.

Знаходимо, що

$$d\Phi = -SdT + VdP - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.16)$$

Дослідимо другу властивість характеристичних функцій. Знайдемо похідні $\Phi = \Phi(T, P, a)$:

$$d\Phi = -\frac{\partial\Phi}{\partial T}dT + \frac{\partial\Phi}{\partial P}dP - \sum_{i=1}^{n'} \frac{\partial\Phi}{\partial a_i}da_i. \quad (48.17)$$

Аналогічно до попереднього легко знайти:

$$\begin{aligned} S &= -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial T}\right)_{P,a}; \\ P &= \left(\frac{\partial\Phi}{\partial P}\right)_{T,a}; \\ A_i &= -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial a_i}\right)_{T,P}. \end{aligned} \quad (48.18)$$

Доведемо третю властивість характеристичних функцій. Розглянемо ізобаро-ізотермічний процес. В цьому випадку зменшення термодинамічного потенціалу для сталих T і P дорівнює роботі зовнішніх сил.

$$-(d\Phi)_{T,P} = \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.19)$$

Четверта властивість буде доведена нижче, де буде показано, що в стані термодинамічної рівноваги, термодинамічний потенціал приймає мінімальне значення.

Ентальпія.

Візьмемо за незалежні змінні S, P, a і покажемо, що такому вибору буде відповідати характеристична функція ентальпія

$$H = U + PV. \quad (48.20)$$

Для того, щоб отримати вираз для повного диференціалу ентальпії, додамо повний диференціал до співвідношення (48.20) від PV

$$dH = TdS - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + PdV + VdP. \quad (48.21)$$

Після скорочення виразу (48.21) запишемо:

$$dH = TdS + VdP - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i. \quad (48.22)$$

Знайдемо повний диференціал від функції $H = H(S, P, a)$:

$$dH = -\frac{\partial H}{\partial S} dS + \frac{\partial H}{\partial P} dP - \sum_{i=1}^{n'} \frac{\partial H}{\partial a_i} da_i. \quad (48.23)$$

Можна записати:

$$\begin{aligned} T &= \left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_{P,a}; \\ V &= \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_{S,a}; \\ A_i &= - \left(\frac{\partial H}{\partial a_i} \right)_{S,P}. \end{aligned} \quad (48.24)$$

Розглянемо такий ізобаричний процес, в якому зовнішні параметри не змінюються. Тоді

$$dH = TdS = \delta Q. \quad (48.25)$$

З виразу (48.25) видно, що зміна ентальпії в такому процесі чисельно дорівнює кількості теплоти. Саме тому іноді ентальпію називають *тепловою функцією*. З виразу (48.25) також видно, що за певних умов, кількість теплоти може бути повним диференціалом. Розглянуті нами характеристичні функції будуть використовуватись для аналізу багатьох фізичних процесів. Як покажемо пізніше, всі розглянуті нами термодинамічні потенціали не являються незалежними. Тобто, якщо відома одна функція, то легко можна буде знайти всі інші.

§49. Залежність термодинамічних потенціалів від числа частинок

До цих пір ми вважали число частинок в системі сталим. Узагальнимо тепер отримане нами співвідношення для випадку систем із змінним числом частинок. До цього часу перший закон термодинаміки писали у вигляді:

$$dU = \delta Q - \delta W. \quad (49.1)$$

Але, якщо число частинок в системі змінюється, то в силу адитивності буде змінюватись і внутрішня енергія. Позначимо через $d_N U$ - зміну внутрішньої енергії системи, що зв'язана із зміною числа частинок на dN , причому

$$d_N U \sim dN. \quad (49.2)$$

Ввівши коефіцієнт пропорційності

$$d_N U = \mu dN, \quad (49.3)$$

де μ - коефіцієнт пропорційності, що відіграє роль хімічного потенціалу.

Тоді узагальнюючи перший закон термодинаміки із змінним числом частинок можна записати:

$$dU = \delta Q - \delta W + \mu dN. \quad (49.4)$$

Підставивши $\delta Q = TdS$, основне термодинамічне співвідношення можна записати у вигляді:

$$dU = TdS - \delta W + \mu dN. \quad (49.5)$$

Підставляючи в співвідношення (49.5) вираз роботи з попереднього параграфа для внутрішньої енергії як характеристичної функції, для систем із змінним числом частинок можна записати:

$$dU = TdS - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + \mu dN. \quad (49.6)$$

Причому хімічний потенціал μ :

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V,a}. \quad (49.7)$$

Загальний вираз для внутрішньої енергії із змінним числом частинок записується:

$$U = U(S, V, a, N). \quad (49.8)$$

Повторюючи викладки попереднього параграфа, можна записати аналогічні вирази для всіх характеристичних функцій:

$$dF = -SdT - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + \mu dN. \quad (49.9)$$

$$dF = -SdT - PdV - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + \mu dN. \quad (49.10)$$

$$d\Phi = -SdT + VdP - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + \mu dN. \quad (49.11)$$

$$dH = TdS + VdP - \sum_{i=1}^{n'} A_i da_i + \mu dN. \quad (49.12)$$

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V,a} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N} \right)_{P,T,a} = \left(\frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,P,a}. \quad (49.13)$$

Вирази (49.12) - це формули за якими безпосередньо розраховують μ . Отримаємо деякі прості вирази для хімічного потенціалу системи. Для цього запишемо найбільш загальний вираз для термодинамічного потенціалу Гіббса

$$\Phi = Nf(P, T), \quad (49.14)$$

де f - функція від P і T .

Залежність (48.14) забезпечує адитивність потенціалу. Як покажемо пізніше, саме такий вигляд будуть мати термодинамічні потенціали, наприклад, для ідеального газу

$$\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N} \right)_{P,T} = f(P, T). \quad (49.15)$$

З виразу (49.14) знаходимо:

$$f(P, T) = \frac{\Phi}{N}. \quad (49.16)$$

Порівнюючи співвідношення (49.15) і (49.16), отримаємо:

$$\mu = \frac{\Phi}{N}. \quad (49.17)$$

Отже, хімічний потенціал системи дорівнює термодинамічному потенціалу Гіббса розрахованому на одну частинку.

Покажемо, що можна ввести таку характеристичну функцію, незалежними змінними якої є T , V , μ для системи із змінним числом частинок. Для цього вираз (49.9) перепишемо у такому вигляді:

$$dF = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^n \mu dN. \quad (49.18)$$

Ми записали в такому вигляді тому, що система містить змінну кількість частинок різних сортів. Тому зручно було б мати такий термодинамічний потенціал за допомогою якого можна було б знайти кількість частинок кожного сорту.

Віднявши від виразу (49.18) диференціал від $d(\sum_{i=1}^n \mu N)$ знаходимо:

$$d\left(F - \sum_{i=1}^n \mu N\right) = -SdT - PdV - \sum_{i=1}^n \mu dN + \sum_{i=1}^n Nd\mu. \quad (49.19)$$

$$d\left(F - \sum_{i=1}^n \mu N\right) = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^n Nd\mu. \quad (49.20)$$

Введемо позначення:

$$\Omega = (F - \mu N). \quad (49.21)$$

З врахуванням виразу (49.21) формула (49.20) прийме вигляд:

$$d\Omega = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^n Nd\mu. \quad (49.22)$$

Вираз (49.21) - характеристична функція, яка називається *великим термодинамічним потенціалом Гіббса* і є аналогом вільної енергії для систем із змінним числом частинок. Отримана величина хімічного потенціалу системи буде використана нами для аналізу умов рівноваги системи, яка можлива за умови рівності температур $T_1 = T_2$, хімічних потенціалів $\mu_1 = \mu_2$, тисків $P_1 = P_2$.

Зауваження: якщо система перебуває в електричному полі, тоді замість хімічного потенціалу використовується електрохімічний потенціал, то вони також повинні бути рівні.

Лекція 14. ТЕПЛОВИЙ ЗАКОН ТА ЙОГО НАСЛІДКИ

§50. Теплова теорема Нернста. (Третій закон термодинаміки).

§51. Наслідки теореми Нернста.

[1. §1.8, §5.4; 2. §2.9; 4. §38; 5. §4.4; 6. §44, §45; 7. §17, §36; 8. §III.8]

§50. Теплова теорема Нернста. (Третій закон термодинаміки)

Теплова теорема Нернста стосується поведінки ентропії під час наближення температури до абсолютного нуля.

Теорема. Якщо $T \rightarrow 0$, то границя

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0. \quad (50.1)$$

Доведення. Теорему Нернста можна довести тільки з врахуванням квантових властивостей в системі, а саме, для врахування квантування фазового простору. Розглянемо стан системи для будь-якої температури, тоді цей стан реалізується числом мікростанів

$$W = \frac{\Delta\Gamma}{h^s}, \quad (50.2)$$

де $\Delta\Gamma$ - величина об'єму фазового простору, у якому зосереджені всі мікростани, що реалізують стан термодинамічної рівноваги системи. Відповідно ентропія:

$$S = k \ln \frac{\Delta\Gamma}{h^s}. \quad (50.3)$$

Як покажемо пізніше, середні енергії системи пропорційні $\Delta\Gamma$ фазового простору в деякому додатному степені, тобто

$$\bar{E} \sim (\Delta\Gamma)^n, \quad n > 0.$$

Так як

$$\bar{E} \sim \Omega(E),$$

$$\downarrow$$

$$E^{\frac{3N}{2}-1}.$$

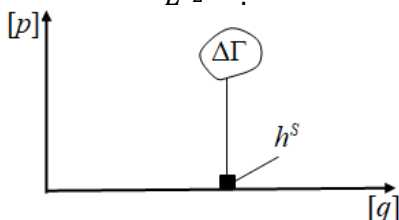


Рис. 42

При зменшенні температури до нуля, об'єм $\Delta\Gamma$ перейде в об'єм h^s , що лежить на осі координат (рис. 42).

Таким чином,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = \lim_{T \rightarrow 0} k \ln \frac{\Delta\Gamma}{h^s} = k \ln \frac{h^s}{h^s}. \quad (50.4)$$

Теорема доведена.

Зауваження: інколи теорему Нернста називають *третьою*

законом термодинаміки. Хоча із самого доведення видно, що ця теорема є безпосереднім наслідком квантових властивостей системи. Вперше теорема Нернста була отримана її автором після аналізу великої кількості експериментальних даних. Тільки пізніше було встановлено її зв'язок з квантуванням простору.

§51. Наслідки теореми Нернста

Поведінка теплоємності для $T \rightarrow 0$.

Покажемо, що для $T \rightarrow 0$ теплоємності $C_P, C_V \rightarrow 0$. Доведемо це твердження на прикладі теплоємності C_P . Згідно другого закону термодинаміки

$$dS = \frac{\delta Q}{T}. \quad (51.1)$$

Звідки

$$\delta Q = TdS. \quad (51.2)$$

Теплоємність

$$C_P = \left(\frac{\delta Q}{T} \right)_P \quad (51.3)$$

або

$$C_P = T \frac{dS}{dT}. \quad (51.4)$$

З співвідношення (51.4) слідує, що

$$dS = C_P(T) \frac{dT}{T}. \quad (51.5)$$

Розглянемо зміну ентропії в ізобаричному процесі, коли температура змінюється від 0 до T'

$$\int_0^{T'} dS = \int_0^{T'} C_P(T) \frac{dT}{T}. \quad (51.6)$$

Тоді інтегруючи ліву частину

$$S(T') - S(0) = \int_0^{T'} C_P(T) \frac{dT}{T}, \quad (51.7)$$

де $S(0) = 0$.

Щоб проінтегрувати рівність (51.7), розкладемо $C_P(T)$ в ряд Маклорена

$$C_P(T) = C_P(0) + C_P'(0)T + \frac{1}{2}C_P''(0)T^2 + \dots \quad (51.8)$$

Підставимо вираз (51.8) у формулу (51.7)

$$S(T') = C_P(0) \int_0^{T'} \frac{dT}{T} + C_P'(0) \int_0^{T'} dT + \frac{1}{2} C_P''(0) \int_0^{T'} T dT + \dots \quad (51.9)$$

В лівій частині виразу (51.9) стоїть скінчена величина $S(T')$, а права частина виразу (51.9) логарифмічно розходиться (розбігається), тому, що

$$C_P(0) \int_0^{T'} \frac{dT}{T} = \ln T|_0^{T'} = -\infty$$

або

$$\lim_{T \rightarrow 0} \ln T = -\infty.$$

Вихід, тобто, щоб усунути цю розбіжність, необхідно прийняти, що

$$C_P(0) = 0. \quad (51.10)$$

Аналогічне буде доведення для $C_V(0) = 0$.

Недосяжність абсолютного нуля.

Доведення цього наслідку проведемо від супротивного, тобто припустимо, що можна створити систему, абсолютна температура якої дорівнює нулю. Прийнемо цю систему за холодильник. Нехай температура нагрівника буде T_1 , тоді в координатах TS цикл Карно для такої машини буде мати такий вигляд (рис. 43):

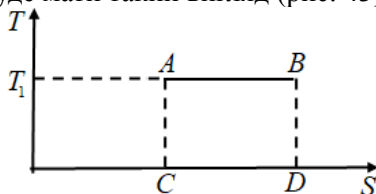


Рис. 43

Нехай наша теплова машина виконує замкнутий процес. Тоді зміна ентропії в такому замкнутому процесі дорівнює нулю:

$$\oint dS = 0. \quad (51.11)$$

З другої сторони цю зміну ентропії можна представити у вигляді:

$$\oint dS = \int_{AB} dS + \int_{BC} dS + \int_{CD} dS + \int_{DA} dS. \quad (51.12)$$

Розглянемо кожен із інтегралів виразу (51.12) в правій частині

окремо

$$\int_{AB} dS = \frac{\Delta Q}{T}; \quad (51.13)$$

$$\int_{BC} dS = 0 \text{ (так як процес адіабатичний);} \quad (51.14)$$

$$\int_{CD} dS = 0 \text{ (в силу теореми Нернста);} \quad (51.15)$$

$$\int_{DA} dS = 0 \text{ (в силу адіабатичності).} \quad (51.16)$$

Сумуючи рівності (51.13), (51.14), (51.15), (51.16) знаходимо

$$\oint dS = \frac{\Delta Q}{T}. \quad (51.17)$$

Бачимо, що вирази (51.17) і (51.11) протирічать один одному. Отже, абсолютний нуль недосягнений.

Поведінка коефіцієнта теплового розширення для $T \rightarrow 0$.

Покажемо, що

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = 0.$$

Як покажемо пізніше:

$$-\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T.$$

Тоді, так як

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = 0 \text{ для } T = 0 \text{ (бо } S(0) = 0),$$

то слідує, що

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = 0 \text{ для } T = 0.$$

Флуктуації за низьких температур

Покажемо, що за зменшення температури флуктуації енергії починають різко зростати. Так, наприклад, для кристалу величина відносної флуктуації $D(E)$, що дорівнює:

$$D(E) = \sqrt{\frac{(\Delta \bar{E})^2}{\bar{E}}} \sim \frac{1}{T^3}$$

або

$$D(E) = \sqrt{\frac{(E - \bar{E})^2}{\bar{E}}} \sim \frac{\Delta \bar{E}}{\bar{E}} \sim \frac{1}{T^3},$$

де $\Delta \bar{E}$ - відхилення середнього значення енергії.

Звідси видно, що із зменшенням температури, флуктуації сильно зростають, оскільки феноменологічна термодинаміка справедлива тільки для станів, в яких флуктуація енергії мала, то за зменшення температури закони феноменологічної термодинаміки будуть не точними із-за росту флуктуацій.

Хоча технічно досягти таких температур надзвичайно важко, так наприклад:

$$D(E) \sim 1, \text{ коли } T \sim 10^{-6} \text{ K},$$

де D - флуктуації.

Зроблений нами висновок важливий з принципової точки зору.

Лекція 15. РІВНЯННЯ СТАНУ ІДЕАЛЬНОГО ГАЗУ

§52. Виведення рівняння стану ідеального газу.

§53. Термодинамічні функції та рівняння стану ідеального газу.

[1. §1.3, §2.1, §6.5; 5. §6.1; 6. §47; 7. §2; 8. §IV.4]

§52. Виведення рівняння стану ідеального газу

Стан системи визначається сукупністю її властивостей і відповідних фізичних характеристик. Як зазначалося, під системою будемо розуміти мікроскопічні фізичні об'єкти дослідження, обмежені певною областю простору. Межа системи може бути як матеріальною (стінки посудини), так і уявною, обмеженою в просторі подумки.

У даному разі розглядатимемо ідеальний газ. Стан маси ідеального газу, якщо немає зовнішніх полів, визначається макроскопічними параметрами. Не всі макроскопічні параметри системи незалежні. Кажуть, що s є число ступенів вільності макроскопічної системи, якщо вона описується s незалежними параметрами. Серед різноманітних зв'язків між характеристиками системи важливе місце займають рівняння стану. Так називається будь-яка залежність рівноважного внутрішнього параметра від зовнішніх параметрів і температури. Розрізняють термічні рівняння

стану, якщо задана узагальнена сила A як функція від a і T та калоричне рівняння стану, якщо внутрішнім параметром є енергія. Такий стан називають *макроскопічним*. Рівняння, яке в стані теплової рівноваги пов'язує всі три макроскопічні характеристики стану ідеального газу, а саме: об'єм V , тиск P і температуру T називають *термічним рівнянням стану*. У загальному вигляді його можна записати так:

$$F(P, V, T) = 0 \text{ або } P = f(V, T). \quad (52.1)$$

Рівняння стану є одним з найважливіших для характеристики властивостей однорідних систем. Воно може бути встановлене або теоретично на основі молекулярно-кінетичних (статистичних) модельних уявлень, або на основі результатів експериментальних досліджень.

Запишемо деякі раніше відомі вирази з молекулярно-кінетичної теорії газів:

$$p = \frac{2}{3} n_0 \overline{m_0 v_{\text{KB}}^2}; \quad (52.2)$$

$$\frac{m_0 \overline{v_{\text{KB}}^2}}{2} = \frac{3}{2} kT. \quad (52.3)$$

На основі рівнянь (52.2) та (52.3) основне рівняння молекулярно-кінетичної теорії газів має вигляд:

$$P = n_0 kT. \quad (52.4)$$

Оскільки $n_0 = \frac{N}{V}$, то

$$PV = NkT. \quad (52.5)$$

Рівняння (52.5) фактично і є термічним рівнянням стану ідеального газу, оскільки воно встановлює зв'язок між P , V і T . Проте це рівняння містить число молекул газу N в об'ємі V , яке не піддається прямому вимірюванню. Тому в рівнянні (52.5) кількість частинок N замінюють їхньою масою m - макроскопічним параметром, що легко визначається дослідно. Для цього скористаємося одиницею кількості речовини - молем. За умови використання моля речовини структурні елементи мають бути специфікованими. Це можуть бути атоми, молекули, іони, електрони, нейтрони, протони або інші частинки чи специфіковані групи частинок.

Позначимо масу одного моля речовини M . В одному молі міститься N_A структурних одиниць речовини (молекул, атомів). Тоді рівняння (52.5) для одного моля ідеального газу має вигляд:

$$PV_M = N_A kT. \quad (52.6)$$

Добуток двох фізичних констант kN_A є також константою, яку називають *універсальною або молярною газовою сталою* і позначають літерою R . Молярна газова стала однакова для всіх газів: $R = 8,31451 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$. Замінивши в рівнянні (52.6) kN_A на R , дістанемо:

$$PV_M = RT. \quad (52.7)$$

Рівняння (52.7) є рівнянням стану для одного моля ідеального газу, встановлене вперше французьким фізиком Б. Клапейроном (1799-1864) і називається *рівнянням Клапейрона*.

Узагальнимо рівняння (52.7) на довільну кількість молів газу. Позначимо кількість молів речовини ν . Тоді рівняння (52.7) запишемо так:

$$PV = \nu RT. \quad (52.8)$$

Якщо маса одного моля речовини M , то в довільній масі m міститься $\nu = \frac{m}{M}$ молів. З іншої сторони, якщо один моль речовини містить N_A структурних одиниць, то N структурних одиниць становитимуть $\nu = \frac{N}{N_A}$ молів. Отже, для довільної кількості молів речовини рівняння (52.8) перепишемо у вигляді:

$$PV = \frac{m}{M}RT \text{ або } PV = \frac{N}{N_A}RT. \quad (52.9)$$

Аналогічні узагальнення вперше провів Д.І. Менделєєв (1834-1907). Рівняння (52.9) є узагальненим рівнянням стану ідеального газу і називається *рівнянням Клапейрона-Менделєєва*.

З'ясуємо зміст молярної газової сталої R . Нехай один моль газу займає об'єм V_1 за температури T_1 і тиску P (рис. 44). Нагріємо газ так, щоб його температура підвищилась на 1 К, тобто $T_2 = T_1 + 1$, а тиск залишився сталим. Тоді поршень переміститься вправо на da і буде виконана робота ($P = \text{const}$).

$$\delta W = Ada = PSda = PdV. \quad (52.10)$$

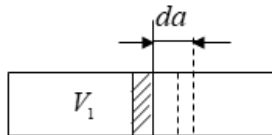


Рис. 44

Початковий стан газу під поршнем $PV_1 = RT_1$, а кінцевий -

$PV_2 = R(T + 1)$. Зміна стану газу

$$PdV = R. \quad (52.11)$$

Порівнюючи вирази (52.10) і (52.11), можна зробити висновок, що *молярна газова стала* R чисельно дорівнює роботі розширення одного моля ідеального газу для ізобарного нагрівання його на 1 К.

Рівняння стану ідеального газу є наближеним, і воно може використовуватись лише в межах застосовності моделі ідеального газу, тобто за умови, коли можна нехтувати власними розмірами (отже, і сумарним власним об'ємом) молекул та міжмолекулярною взаємодією. Реально це має місце за порівняно низьких тисків і достатньо високих температур. Нормальні атмосферні умови в основному задовольняють вимоги ідеального газу. Однак зі збільшенням тиску і зниженням температури все більше порушуватимуться модельні припущення ідеального газу і, отже, використання рівняння стану ідеального газу стає проблематичним.

§53. Термодинамічні функції та рівняння стану ідеального газу

В попередніх лекціях (§27) ми отримали вирази для вільної енергії та ентропії ідеального газу:

$$F = -NkT \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + 1 \right); \quad (53.1)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{5}{2} \right). \quad (53.2)$$

Було також доведено, що

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,a}; \quad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,a}. \quad (53.3)$$

Продиференціювавши (53.1) за об'ємом знаходимо:

$$P = kTN \left(\frac{N}{V} \frac{1}{N} \right) = \frac{kTN}{V} \quad (53.4)$$

або

$$P = NkT. \quad (53.5)$$

Це співвідношення рівняння стану ідеального газу - *рівняння Менделєєва-Клапейрона*. Знаючи вільну енергію (53.1), можна знайти й інші термодинамічні функції для ідеального газу, наприклад внутрішню енергію U :

$$U = F + TS \quad (53.6)$$

або ентальпію H :

$$H = U + PV. \quad (53.7)$$

У випадку одноатомного ідеального газу числовий вираз для внутрішньої енергії:

$$\begin{aligned} U &= F + TS = \\ &= -NkT \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + 1 \right) + \\ &\quad + TNk \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{5}{2} \right) = \\ &= -NkT \ln \frac{V}{N} - \frac{3}{2} NkT \ln T - NkT \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} - NkT + NkT \ln \frac{V}{N} + \\ &\quad + \frac{3}{2} NkT \ln T - NkT \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} + \frac{5}{2} NkT = -NkT + \frac{5}{2} NkT = \\ &= \frac{3}{2} NkT. \end{aligned}$$

Отже,

$$U = \frac{3}{2} NkT. \quad (53.8)$$

Відповідно вираз для ентальпії буде таким:

$$\begin{aligned} H &= U + PV = U + NkT = \frac{3}{2} NkT + NkT = \frac{5}{2} NkT; \\ H &= \frac{5}{2} NkT. \end{aligned} \quad (53.9)$$

Зауваження: вирази (53.8) та (53.9) не є характеристичними функціями, оскільки не містять залежностей від необхідних термодинамічних параметрів.

Лекція 16. РОЗПОДІЛ МАКСВЕЛЛА

§54. Поняття про статистичний розподіл.

§55. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за проекціями їх імпульсу (швидкості).

§56. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за модулем їх

імпульсу (швидкості).

§57. Експериментальна перевірка розподілу Максвелла.

§58. Дослід Штерна.

[1. §6.2; 6. §46; 7. §42, §43; 8. §IV.1]

§54. Поняття про статистичний розподіл

У стані статистичної рівноваги в ідеальному газі, яка настає внаслідок зіткнень молекул між собою, встановлюється розподіл молекул за швидкостями, що не змінюється з часом. Визначити, яким буде цей розподіл - одна із задач статистичної фізики.

Розглянемо спочатку суть задачі про розподіл. На перший погляд здається, що знайти розподіл молекул за швидкостями означає перерахувати кількість молекул, які мають певні строго визначені швидкості. Така задача не є коректною. По-перше, тому що подібні підрахунки практично здійснити неможливо, а по-друге, швидкість молекул є неперервною величиною і вказати точне значення швидкості неможливо. Тому задача про розподіл формулюється так: скільки з усіх наявних молекул мають швидкості, значення яких лежать у певному інтервалі швидкостей в околі заданої швидкості?

В 1860 році Максвелл теоретично довів, що в газі, який перебуває в стані термодинамічної рівноваги, встановлюється розподіл молекул за швидкостями. Тобто, в рівноважному газі завжди буде деяка кількість молекул, що мають як дуже малі так і дуже великі швидкості, а також певна кількість молекул із проміжним значенням швидкості. Інакше кажучи, наявність стану термодинамічної рівноваги зовсім не означає, що тоді всі молекули газу матимуть однакові швидкості. В 1867 р. Максвелл довів, що зіткнення між молекулами не змінюють характеру їх розподілу за швидкостями, тобто розподіл за швидкостями буде стійким в часі за умови, що система перебуває в стані термодинамічної рівноваги. Особлива важливість розподілу Максвелла полягає в тому, що його вигляд не залежить від початкових умов, в яких перебувала система.

Тобто, якщо розглянути кілька тотожних макроскопічних систем, що знаходяться в термостаті і перебувають в початкових нерівноважних станах, то після припинення дії зовнішніх факторів, що зумовили появу нерівноважності, кожна з них прийде в рівноважний стан, який буде описуватись тим самим розподілом Максвелла. (Цей факт вперше був доведений Больцманом в 1877 році). Слід зазначити, що єдиною необхідною умовою

встановлення в системі розподілу Максвелла є її класичність, тобто умови, в яких знаходиться система, дозволяють описувати рух частинок за допомогою класичних рівнянь Ньютона.

Ми виведемо розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за швидкостями, використовуючи канонічний розподіл Гіббса (тобто, використовуючи функцію розподілу для системи в термостаті). Спосіб виведення розподілу Максвелла, який розглядався в курсі загальної фізики, вимагає додаткових припущень, обґрунтування яких є досить складною справою. Статистичний метод, який ми використаємо для отримання розподілу Максвелла, дає можливість уникнути цих ускладнень і значно спростити розрахунки. Отримані цим методом результати матимуть загальний характер, зокрема будуть справедливими не тільки для ідеального газу, а і для реального. Зауважимо, що розподіл Максвелла був першим прикладом статистичного закону не тільки в фізиці, а і в науці взагалі.

§55. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за проекціями їх імпульсу (швидкості)

Першою задачею, яка була розв'язаною в класичній статистиці був розподіл молекул за швидкостями встановлений Максвеллом в 1860 році. В 1867 році Максвелл довів, що зіткнення між молекулами не змінює характеру їх розподілу за швидкостями. Пізніше було встановлено, що незалежно від того яким способом прийшла до цього стану система, розподіл молекул за швидкостями, що встановиться в стані термодинамічної рівноваги буде в усіх випадках один і той же.

Це показує, що розподіл Максвелла характеризує стан термодинамічної рівноваги, а не спосіб прямування до нього. В процесі розрахунків ми будемо мати справу з ймовірністю того, що дану швидкість буде мати певне число молекул. Це пов'язано з тим, що число частинок системи надзвичайно велике і процес набуття молекулою тієї чи іншої швидкості є подія випадкова.

Максвелл отримав розподіл за швидкостями досить складним шляхом. Наше доведення буде базуватись на канонічному розподілі Гіббса

$$\rho(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}}. \quad (55.1)$$

Вираз (55.1) задає густину ймовірності того, що координати та проекції імпульсу кожної молекули лежать в певних межах:

$$\begin{aligned} & [x_1, x_1 + dx_1] \dots [x_i, x_i + dx_i] \dots [x_N, x_N + dx_N]; \\ & [y_1, y_1 + dy_1] \dots [y_i, y_i + dy_i] \dots [y_N, y_N + dy_N]; \\ & [z_1, z_1 + dz_1] \dots [z_i, z_i + dz_i] \dots [z_N, z_N + dz_N]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [p_{1x}, p_{1x} + dp_{1x}] \dots [p_{ix}, p_{ix} + dp_{ix}] \dots [p_{Nx}, p_{Nx} + dp_{Nx}]; \\ & [p_{1y}, p_{1y} + dp_{1y}] \dots [p_{iy}, p_{iy} + dp_{iy}] \dots [p_{Ny}, p_{Ny} + dp_{Ny}]; \\ & [p_{1z}, p_{1z} + dp_{1z}] \dots [p_{iz}, p_{iz} + dp_{iz}] \dots [p_{Nz}, p_{Nz} + dp_{Nz}]. \end{aligned}$$

Запишемо тепер вираз для ймовірності:

$$dW(q, p) = \frac{1}{Z} \int e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} dq dp. \quad (55.2)$$

Знайдемо тепер ймовірності того, що проекції імпульсу довільної i -тої частинки лежать в межах:

$$\begin{aligned} & [p_{ix}, p_{ix} + dp_{ix}]; \\ & [p_{iy}, p_{iy} + dp_{iy}]; \\ & [p_{iz}, p_{iz} + dp_{iz}]. \end{aligned}$$

Тобто розглянемо розподіл Максвелла за проекціями імпульсу. Для того, щоб знайти шуканий розподіл необхідно проінтегрувати канонічний розподіл Гіббса за координатами всіх частинок та за проекціями імпульсу всіх частинок, крім i -тої, тоді шукана ймовірність у виразі (55.2) має такий вигляд:

$$\begin{aligned} & dW(p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \\ & = \left(\frac{1}{Z} \int \underbrace{\dots}_{(3N \text{ по } q)} \int \cdot \int \underbrace{\dots}_{(3N-3 \text{ по } p)} \int e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} dq dp' \right) dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}, \quad (55.3) \end{aligned}$$

де $dp = dp' dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}$.

Виділимо із функції Гамільтона системи, кінетичну енергію i -тої частинки

$$H(q, p) = \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} + H'. \quad (55.4)$$

Співвідношення (55.4) можна записати як для ідеального так і для реального газу, тому отриманий нами розподіл буде справедливий для обох видів газів, а також для рідин і твердих тіл.

Підставимо співвідношення (55.4) у вираз (55.3)

$$dW(p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \left(\frac{1}{Z} \int \underbrace{\dots}_{(3N \text{ по } q)} \int \cdot \int \underbrace{\dots}_{(3N-3 \text{ по } p)} \int e^{-\frac{H'}{\theta}} dq dp' \right) \times$$

$$\times e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}. \quad (55.5)$$

У цьому виразі у дужках містяться означені інтеграли, які у підсумку дають деяке число, яке можна позначити C . Тобто

$$C = \frac{1}{Z} \int \underbrace{\quad}_{(3N \text{ по } q)} \cdot \int \underbrace{\quad}_{(3N-3 \text{ по } p)} \int e^{-\frac{H'}{\theta}} dq dp'. \quad (55.6)$$

Константу C в співвідношенні (55.6) знайдемо з умови нормування:

$$C \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = 1. \quad (55.7)$$

Вираз (55.7) можна представити дещо в іншому вигляді:

$$\begin{aligned} C \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = \\ = C \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{ix}^2}{2m\theta}} dp_{ix} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{iy}^2}{2m\theta}} dp_{iy} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{iz}. \end{aligned} \quad (55.8)$$

Інтеграли у виразі (55.8) - це інтеграли Пуассона. Інтеграл Пуассона має вигляд:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (55.9)$$

З врахуванням виразу (55.9) можемо записати:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_{ix}^2}{2m\theta}} dp_{ix} = \sqrt{2\pi m\theta}. \quad (55.10)$$

Врахувавши значення інших інтегралів у формулі (55.8), отримаємо:

$$C(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}} = 1, \quad (55.11)$$

$$C = (2\pi m\theta)^{-\frac{3}{2}}. \quad (55.12)$$

В результаті вираз (55.5) набуває вигляду:

$$dW(p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}. \quad (55.13)$$

Вираз (55.13) дає ймовірність того, що проекції імпульсу довільної i -

тої молекули лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[p_{ix}, p_{ix} + dp_{ix}]; \\ &[p_{iy}, p_{iy} + dp_{iy}]; \\ &[p_{iz}, p_{iz} + dp_{iz}]. \end{aligned}$$

Це і є фізичний зміст розподілу Максвелла за проекціями імпульсу молекул рівноважного газу.

Тоді функція розподілу для проекцій імпульсів довільної i -тої молекули запишеться:

$$\rho(p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \frac{dW(p_{ix}, p_{iy}, p_{iz})}{dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}} = \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m\theta}}. \quad (55.14)$$

Оскільки вираз (55.13) може бути справедливий не тільки для i -тої частинки, але й для довільної молекули. У цьому випадку знехтуємо індексом « i » біля проекцій імпульсів у формулі (55.13) та запишемо її у вигляді:

$$dW(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m\theta}} dp_x dp_y dp_z. \quad (55.15)$$

Вираз (55.15) дає нам ймовірність того, що проекції імпульсу довільної молекули газу лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[p_x, p_x + dp_x]; \\ &[p_y, p_y + dp_y]; \\ &[p_z, p_z + dp_z] \end{aligned}$$

і називається *розподілом Максвелла за проекцією імпульсу молекули*. Легко бачити, що розподіл (55.15) може бути записаний у вигляді:

$$dW(p_x, p_y, p_z) = dW(p_x) dW(p_y) dW(p_z). \quad (55.16)$$

Причому в рівнянні (55.16):

$$dW(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_x^2}{2m\theta}} dp_x; \quad (55.17)$$

$$dW(p_y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_y^2}{2m\theta}} dp_y; \quad (55.18)$$

$$dW(p_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_z^2}{2m\theta}} dp_z; \quad (55.19)$$

Виходячи з (55.15) легко знайти густину вказаної ймовірності:

$$\rho(p_x, p_y, p_z) = \frac{dW(p_x, p_y, p_z)}{dp_x dp_y dp_z} = \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m\theta}}. \quad (55.20)$$

Функція розподілу (55.20) дає густину ймовірності різних значень проекцій імпульсу довільної молекули системи і називається *розподілом Максвелла за проекціями імпульсу молекул рівноважного газу*.

З виразів (55.17) - (55.19) можна тепер отримати функції розподілу за відповідними проекціями імпульсу:

$$\rho(p_x) = \frac{dW(p_x)}{dp_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_x^2}{2m\theta}}; \quad (55.17)$$

$$\rho(p_y) = \frac{dW(p_y)}{dp_y} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_y^2}{2m\theta}}; \quad (55.18)$$

$$\rho(p_z) = \frac{dW(p_z)}{dp_z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\theta}} e^{-\frac{p_z^2}{2m\theta}}; \quad (55.19)$$

Отримаємо тепер розподіл Максвелла за проекцією швидкості. Для цього у виразі (55.15) замість проекції імпульсу частинки зробимо заміну: $p_x = mv_x$, $p_y = mv_y$, $p_z = mv_z$. В результаті

$$dW(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2\theta}} dv_x dv_y dv_z. \quad (55.20)$$

Вираз (55.20) є *розподілом Максвелла за проекціями швидкості молекул рівноважного газу* і його фізичний зміст полягає в тому, що він дає ймовірність того, що проекції швидкості довільної молекули лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[v_x, v_x + dv_x]; \\ &[v_y, v_y + dv_y]; \\ &[v_z, v_z + dv_z]. \end{aligned}$$

Аналогічно до виразу (55.16) цю ймовірність можна представити у вигляді добутку таким чином:

$$dW(v_x, v_y, v_z) = dW(v_x) dW(v_y) dW(v_z). \quad (55.21)$$

Для окремої компоненти швидкості розподіл Максвелла можна записати:

$$dW(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}, \quad (55.22)$$

$$dW(v_y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_y^2}{2\theta}}, \quad (55.23)$$

$$dW(v_z) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_z^2}{2\theta}}. \quad (55.24)$$

Відповідну густину ймовірності можна записати у вигляді:

$$\rho(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2\theta}}. \quad (55.25)$$

У формулі (55.25) функція розподілу $\rho(v_x, v_y, v_z)$ задає густину ймовірності різних значень проєкцій швидкості довільної молекули рівноважного газу і називається *розподілом Максвелла за проєкціями швидкості молекул рівноважного газу*.

Вираз (55.25) теж можна представити у вигляді добутку. Причому:

$$\rho(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}. \quad (55.26)$$

$$\rho(v_y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_y^2}{2\theta}}. \quad (55.27)$$

$$\rho(v_z) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\theta}} e^{-\frac{mv_z^2}{2\theta}}. \quad (55.28)$$

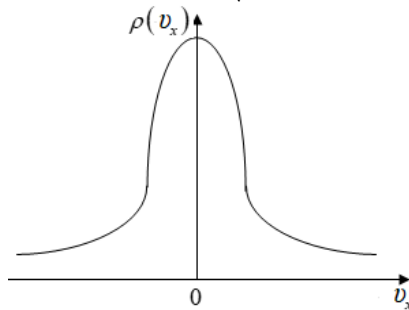


Рис. 45

Приведемо графічний вигляд функції (55.26) (рис. 45). На рисунку 45 представлений вигляд функції розподілу $\rho(v_x)$ за однією із проєкцій швидкості v_x .

§56. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за модулем їх імпульсу (швидкості)

Отримаємо тепер розподіл Максвелла за модулем імпульсу молекули. Для цього розглянемо простір імпульсів: це тривимірний простір на осях якого відкладаємо проєкції імпульсу однієї молекули (рис. 46). Графічно розподіл Максвелла (55.13) дає ймовірність того, що вектор імпульсу довільної молекули має довжину $|\vec{p}|$ і такий напрямок, що він попадає в зображений елемент об'єму. Інакше

кажучи, що імпульс лежить в межах: $[p_x, p_x + dp_x]$.

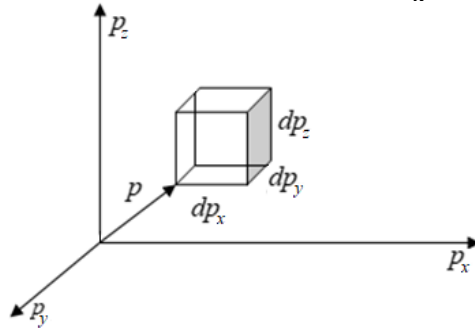


Рис. 46

Задача. Знайти ймовірність того, що модуль імпульсу довільної молекули лежить в межах: $[p, p + dp]$.

Очевидно, що даній умові буде задовольняти область простору, що лежить між двома сферами з радіусами $p, p + dp$. Розріз цієї області площиною Z_{0x} має такий вигляд (рис. 47):

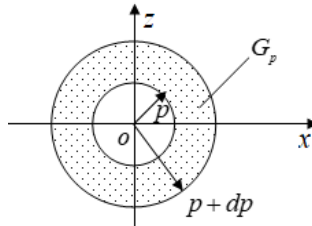


Рис. 47.

Отже, для того, щоб знайти ймовірність попадання зображеної точки в просторі імпульсу (це точка проекції імпульсів, якої співпадають з проекціями імпульсів молекул) в область G_p . Для того, щоб знайти вказану ймовірність, треба вираз (55.13) проінтегрувати по області G_p .

$$\begin{aligned} dW(p) &= \iiint_{G_p} dW(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} \iiint_{G_p} dp_x dp_y dp_z = \\ &= \frac{1}{(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} 4\pi p^2 dp. \end{aligned} \quad (56.1)$$

Отже, для ймовірності $dW(p)$ маємо:

$$dW(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(\pi m \theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} p^2 dp. \quad (56.2)$$

Вираз (56.2) називається *розподілом Максвелла за модулем імпульсу*. Фізичний зміст цього розподілу полягає в тому, що величина $dW(p)$, яка визначається виразом (56.2) дає ймовірність того, що модуль імпульсу довільної молекули рівноважного газу знаходиться в межах $[p, p + dp]$.

Відповідно до попереднього можна записати густину ймовірності:

$$\rho(p) = \frac{dW(p)}{dp} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(\pi m \theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} p^2. \quad (56.3)$$

У формулі (56.3) це і є функція розподілу, яка називається *розподілом Максвелла за модулем імпульсу рівноважного газу*.

Отримаємо розподіл Максвелла за модулем швидкості, для цього підставимо в співвідношення (56.2)

$$p = mv. \quad (56.4)$$

Звідси маємо:

$$dW(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}} v^2 dv. \quad (56.5)$$

Вираз (56.5) називається *розподілом Максвелла за модулем швидкості*. Він дає, що модуль швидкості довільної молекули рівноважного газу лежить в межах: $[v, v + dv]$. Запишемо тепер густину ймовірності:

$$\rho(v) = \frac{dW(v)}{dv} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}} v^2. \quad (56.6)$$

Графік функції $\rho(v)$ подано на рисунку 48. Те значення швидкості, для якого ця функція максимальна, називається *найбільш ймовірним значенням швидкості* $v_{н.і.}$. Його легко знайти, якщо прирівняти до нуля похідну від функції розподілу (56.6). Дана функція має такий вигляд (див. рис. 48).

Як покажемо пізніше, найбільш ймовірна швидкість:

$$v_{н.і.} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (56.7)$$

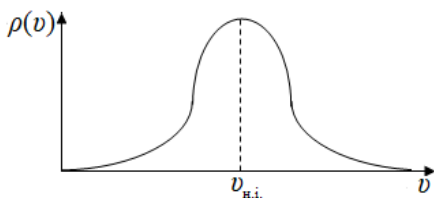


Рис. 48

Формула середньої найбільш ймовірної швидкості використовується для опису розподілу швидкостей молекул в газі або іншій суспільній системі, яка розглядається в рамках статистичної фізики. Формула (56.7) дозволяє знайти швидкість, яка найімовірніше зустрічається серед всіх можливих значень швидкості частинок. Вона допомагає у розумінні розподілу швидкостей молекул в газовій системі та є важливою для розрахунків у фізиці газів і хімічних реакціях. В шкільному курсі фізики вираз (56.7) приводиться без доведення. Нами він отриманий строго.

За допомогою знайденої нами функції розподілу легко обчислити середню швидкість молекул, яка визначається згідно із загальним правилом обчислення середнього значення:

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v \rho(v) dv. \quad (56.8)$$

Після інтегрування знаходимо

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (56.9)$$

У статистичній фізиці, формула середньої арифметичної швидкості застосовується для опису середньої швидкості частинок у термодинамічних системах, таких як гази, рідини або тверді тіла. Вона допомагає встановити зв'язок між кінетичною енергією частинок та температурою системи.

У контексті статистичної фізики, середня арифметична швидкість визначається як середнє значення швидкості часток в системі. Ця швидкість визначається розподілом швидкостей часток у системі.

Аналогічно можна розрахувати і середню квадратичну швидкість:

$$\bar{v}_{\text{KB}} = \int_0^{\infty} v^2 \rho(v) dv. \quad (56.10)$$

Після підстановки в цей вираз функції розподілу $\rho(v)$ та інтегрування отримаємо:

$$\bar{v}_{\text{KB}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (56.11)$$

Формула (56.11) для середньої квадратичної швидкості дає змогу обчислити середню швидкість частинки чи об'єкта протягом певного періоду часу. Вона використовується для визначення швидкості руху об'єкта у фізиці та інженерії.

§57. Експериментальна перевірка розподілу Максвелла

Всім отриманим розподілам можна надати дещо іншого вигляду. Для прикладу розглянемо розподіл за модулем швидкості (56.6). Нехай N - загальне число частинок системи, а $dN(v)$ - число частинок, модуль швидкості яких лежить в межах $[v, v + dv]$. Тоді, за означенням, відношення $\frac{dN}{N}$ буде дорівнювати ймовірності $dW(v)$:

$$dW(v) = \frac{dN(v)}{N}. \quad (57.1)$$

Звідси отримуємо:

$$dN(v) = N \cdot dW(v). \quad (57.2)$$

Якщо у виразі (57.2) підставити значення ймовірності $dW(v)$, то отримаємо наступну рівність:

$$dN(v) = NdW(v) = N \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}} v^2 dv. \quad (57.3)$$

За допомогою цього співвідношення тепер можна знайти число молекул $N[v_1, v_2]$, швидкість яких лежить в межах від v_1 до v_2 :

$$N[v_1, v_2] = \int_{v_1}^{v_2} NdW(v) = N \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{\theta}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{v_1}^{v_2} e^{-\frac{mv^2}{2\theta}} v^2 dv. \quad (57.4)$$

Таким чином, використовуючи вираз (57.4) можна безпосередньо підрахувати число молекул, модуль швидкості, яких лежить в межах від $[v, v + dv]$. Особливо відмітимо, що з виразу (57.4) слідує, що в системі завжди є певна кількість молекул з будь-якою

наперед заданою швидкістю, тобто завжди є як дуже швидкі, так і дуже повільні молекули. Наприклад, близько 57% молекул за кімнатної температури мають швидкість за більш ймовірну. Близько 87% молекул мають швидкість, що лежить в інтервалі $[0,5 v_{н.і.} \div 2 v_{н.і.}]$.

Дуже важливо відзначити, що наслідком, розподілу Максвелла є існування в рівноважному газі для будь-яких температур деякого числа дуже швидких або дуже повільних молекул.

Всі отримані нами розподіли Максвелла, як за проекціями швидкості, так і за проекціями імпульсу справедливі для ідеальних та реальних газів. Єдиною необхідною умовою справедливості цих розподілів є класичність систем. Зрозуміло, що рух частинок в системі підлягає законам Ньютона. Умови класичності будуть розглянуті нами пізніше. Таким чином, в класичній системі (реальному чи ідеальному газі) справедливий розподіл Максвелла (в будь-якому вигляді), (за імпульсом, проекцією імпульсу, проекції швидкості). Причому він не залежить ні від способу прямування системи до стану термодинамічної рівноваги і не порушується під час зіткнення молекул між собою.

Розподіл Максвелла за швидкостями був ретельно перевірений в багатьох експериментах: в дослідях Річардсона (1921 р.), дослідях Елдріджа (1927 р.), в дослідях Міллера та Куша (1955 р) та ін. З шкільного курсу фізики добре відомо дослід Штерна (1920 р.), за допомогою якого було виконано вимірювання швидкостей молекул газу. Для швидкості атомів срібла (при температурі $T \approx 1200^\circ\text{C}$) було отримано значення швидкості від 560 до 640 м/с, близьке до величини середньоквадратичної швидкості $\bar{v}_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$ (приблизно 584 м/с). Хороше співпадання теоретичних розрахунків з експериментальними даними було важливим доказом правильності всіх результатів молекулярно-кінетичної теорії газів.

Спостереження Ж.Б. Перена за поведінкою у броунівському русі, вимірювання О.У. Річардсоном (1879-1959) швидкості електронів, що вилітають із поверхні розжареного тіла, а також дослідження молекулярних пучків підтверджують основні формули кінетичної теорії газів і, зокрема, закон розподілу молекул за швидкостями Максвелла.

Докладніше розподіл швидкостей у молекулярному пучку парів ртуті дослідив Ламмерт у 1929 році за допомогою двох дисків з радіальними щілинами, зміщеними одна відносно одної на деякий кут

φ (рис. 49).

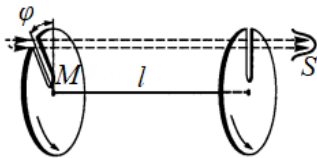


Рис. 49

Диски були насаджені на спільну вісь на певній відстані один від одного. У цьому випадку з молекулярного пучка M , що виділявся першим диском, крізь щілину другого диска могли проходити лише ті молекули, які проходили відстань між дисками точно за той час, протягом якого диски поверталися на кут φ .

Швидкості таких молекул знаходили з рівності

$$\frac{l}{v} = \frac{\varphi}{\omega}.$$

Обертаючи диски з іншою швидкістю ω , з пучка виділяли молекули, що мали іншу швидкість. Збираючи ці молекули у кожному випадку за той самий проміжок часу на охолоджених пластинах S , визначали їхню відносну кількість у пучку; знаходили ті, які відповідали найімовірнішій швидкості.

Досліди Ламмерта підтвердили закон розподілу Максвелла.

На завершення цього параграфу відзначимо, що статистичний метод, який був використаний нами під час виведення розподілу Максвелла, не вимагає ніяких спеціальних припущень стосовно структури молекул та характеру взаємодії між ними, оскільки вигляд функції Гамільтона $H(q, p)$ не конкретизувався. Тому розподіл Максвелла можна застосовувати не тільки до газів, а й до рідин та до твердих тіл. Єдиною необхідною умовою є умова класичності системи. Математичне формулювання цієї умови буде розглянуте пізніше.

§58. Дослід Штерна

Перше експериментальне визначення швидкостей молекул було зроблене німецьким фізиком О. Штерном (1888-1970) у 1920 році.

О. Штерн безпосередньо виміряв швидкості молекул таким способом. Прилад для вимірювання складається з двох жорстко з'єднаних коаксіальних циліндрів (рис. 50), які можна було привести в швидке обертання навколо спільної осі O . Радіус великого циліндра 5-

6 см; на бічній поверхні малого циліндра вирізана вузька щілінка - діафрагма D ; по осі циліндрів натягнута платинова нитка, вкрита сріблом. Усередині циліндрів розрідження до 10^{-4} Па. Під час дослідів по платиновій нитці пропускали електричний струм. Тоді нитка нагрівалася і срібло випаровувалося. Молекулярний пучок пари срібла, що виділявся діафрагмою D , осідав на стінці великого скляного циліндра і утворював чітке зображення діафрагми S_0 . Після цього циліндри приводили в швидке обертання 2700 об/хв. Після тривалого обертання на стінці зовнішнього циліндра утворювалася зміщена і розмита смужка срібла.

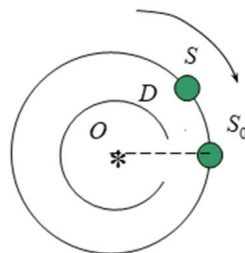


Рис. 50

Зміщення смужки срібла пояснюється тим, що за час руху молекул до стінки циліндра останній повертається на S_0S . Для цього проміжку можна записати рівність

$$\frac{R}{v} = \frac{S_0S}{2\pi Rv'}$$

з якої визначається швидкість молекул

$$v = \frac{2\pi R^2 v'}{S_0S}.$$

Розмитість смужки свідчила про те, що атоми срібла вилітають із джерела з різними швидкостями. Найбільш густа частина смужки, певно, утворилася від осідання атомів, які переміщувалися з найбільш ймовірною швидкістю. Дослідні вимірювання швидкостей молекул добре узгоджувалися з обчисленими за формулою кінетичної теорії. Наприклад, в одному з дослідів для $T = 1473$ К найбільш ймовірна швидкість дорівнювала 675 м/с, а за обчисленнями - 672 м/с.

Точніше розподіл швидкостей у молекулярному пучку парів ртуті дослідив Ламберт у 1929 році.

Лекція 17. РОЗПОДІЛ МАКСВЕЛЛА-БОЛЬЦМАНА

§59. Розподіл Максвелла-Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за швидкостями та координатами).

§60. Класична статистика Максвелла-Больцмана для ідеального

газу.

[1. §6.1; 2. §4.1; 5. §6.2; 6. §48, §50; 7. §44; 8. §IV.2]

§59. Розподіл Максвелла-Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за швидкостями та координатами)

Оскільки мікростан газу задається сукупністю координат та проєкцій швидкості чи проєкцій імпульсів всіх молекул газу, то зрозумілим є питання про вигляд розподілу молекул газу саме за цими параметрами. Особливо актуальним це стає у випадку, коли газ перебуває в зовнішньому силовому полі. Тоді його молекули мають потенціальну енергію, і припущення про їх рівномірний розподіл в просторі стає неправильним. В зв'язку з цим необхідно знайти розподіл молекул газу за координатами та проєкціями імпульсу в зовнішньому полі.

Розглянемо ідеальний одноатомний газ і представимо функцію Гамільтона цього газу у вигляді:

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} + U(x_i, y_i, z_i) \right), \quad (59.1)$$

де $p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2$ - проєкції імпульсів i -тої частинки; $U(x_i, y_i, z_i)$ - потенціальна енергія i -тої частинки в зовнішньому силовому полі.

Знайдемо тепер ймовірність того, що координати і проєкції імпульсів довільної i -тої частинки лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[x_i, x_i + dx_i]; \\ &[y_i, y_i + dy_i]; \\ &[z_i, z_i + dz_i]; \\ &[p_{ix}, p_{ix} + dp_{ix}]; \\ &[p_{iy}, p_{iy} + dp_{iy}]; \\ &[p_{iz}, p_{iz} + dp_{iz}]. \end{aligned}$$

Для розв'язання задачі необхідно проінтегрувати канонічний розподіл Гіббса за координатами всіх частинок крім i -тої та проєкціями імпульсу крім i -тої. Повторюючи викладення попереднього параграфу, отримаємо:

$$\begin{aligned} &dW(x_i, y_i, z_i, p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \\ &= \left(\frac{1}{Z} \int \underbrace{\quad}_{(3N-3 \text{ по } q)} \int \cdot \int \underbrace{\quad}_{(3N-3 \text{ по } p)} \int e^{-\frac{H'}{\theta}} dq' dp' \right) \times \end{aligned}$$

$$\times e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}-\frac{U(x_i,y_i,z_i)}{\theta}} dx_i dy_i dz_i, dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}. \quad (59.2)$$

У цьому виразі в дужках містяться означені інтеграли, які у підсумку дають деяке число, яке можна позначити C . Тобто

$$C = \frac{1}{Z} \int \underbrace{\quad}_{(3N-3 \text{ по } q)} \int \cdot \int \underbrace{\quad}_{(3N-3 \text{ по } p)} \int e^{-\frac{H'}{\theta}} dq' dp'. \quad (59.3)$$

Так як C константа, то її можна знайти з умови нормування:

$$C \iiint e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} \iiint e^{-\frac{U(x_i,y_i,z_i)}{\theta}} dx_i dy_i dz_i = 1. \quad (59.4)$$

Якщо ввести позначення $C = \frac{1}{Z_0}$, де Z_0 визначається виразом:

$$Z_0 = \iiint e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} \iiint e^{-\frac{U(x_i,y_i,z_i)}{\theta}} dx_i dy_i dz_i. \quad (59.5)$$

Тоді вираз для ймовірності буде мати вигляд:

$$\begin{aligned} dW(x_i, y_i, z_i, p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) &= \\ &= \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}-\frac{U(x_i,y_i,z_i)}{\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} dx_i dy_i dz_i. \end{aligned} \quad (59.6)$$

Функція розподілу для координат та проекцій імпульсу i -тої частинки буде мати вигляд:

$$d\rho(x_i, y_i, z_i, p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}) = \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2}{2m\theta}-\frac{U(x_i,y_i,z_i)}{\theta}}. \quad (59.7)$$

Так як отриманні співвідношення (59.6) та (59.7) можна використовувати не тільки для i -тої частинки, але й для довільної молекули, то можна записати:

$$\begin{aligned} dW(x, y, z, p_x, p_y, p_z) &= \\ &= \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m\theta}-\frac{U(x,y,z)}{\theta}} dp_x dp_y dp_z dx dy dz. \end{aligned} \quad (59.8)$$

Функція розподілу матиме вигляд:

$$\rho(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m\theta}-\frac{U(x,y,z)}{\theta}}. \quad (59.9)$$

У формулі (59.9) відповідна функція розподілу задає густину ймовірності різних значень координат та проекцій імпульсу довільної молекули одноатомного ідеального газу і називається *розподілом Максвелла-Больцмана*.

Фізичний зміст розподілу Максвелла-Больцмана полягає в тому, що величина $dW(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ дає ймовірність того, що координати та проекції імпульсу довільної молекули одноатомного ідеального газу лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[x, x + dx]; \\ &[y, y + dy]; \\ &[z, z + dz]; \\ &[p_x, p_x + dp_x]; \\ &[p_y, p_y + dp_y]; \\ &[p_z, p_z + dp_z]. \end{aligned}$$

Як слідує із самого виведення, цей закон справедливий тільки для ідеального газу.

Розподіл Максвелла-Больцмана можна представити ще й у такому вигляді:

$$\begin{aligned} &dW(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \\ &= \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{p_x^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{p_y^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{p_z^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}} dp_x dp_y dp_z dx dy dz. \quad (59.10) \end{aligned}$$

Той факт, що розподіл Максвелла-Больцмана розпався на кілька співмножників вказує на те, що ймовірність певних значень координат та проекцій імпульсу є статистично незалежними подіями. Отже, розподіл Максвелла-Больцмана розпадається на два *незалежних рівноважних розподіли*: перший описує розподіл молекул ідеального газу в просторі імпульсів, а другий характеризує їх розподіл у звичайному координатному просторі. Дуже важливо, що в околі даної точки цього фазового простору розподіл молекул за проекціями імпульсу (або за проекціями швидкості) буде максвеллівським, хоча значення потенціальної енергії молекул у різних точках простору можуть і відрізнятись між собою.

Підкреслимо ще раз, що *розподіл Максвелла-Больцмана, як і розподіл Максвелла, є рівноважним статистичним розподілом та придатний лише для опису систем, що перебувають в стані термодинамічної рівноваги*. Якщо газ знаходиться в нерівноважних умовах, коли є, наприклад, градієнт температури, і в газі буде відбуватись процес теплопередачі, то розподілом Максвелла-Больцмана в цьому випадку користуватись не можна. У встановлені термодинамічної рівноваги, коли процес теплопередачі припиниться і температура в різних об'ємах газу вирівняється, то в усьому газі встановиться розподіл Максвелла за проекціями імпульсу (або за

швидкостями) молекул, а розподіл частинок в просторі визначатиметься координатною частиною розподілу Максвелла-Больцмана.

Величину $dW(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ для розподілу Максвелла-Больцмана можна переписати так:

$$\begin{aligned} dW(x, y, z, p_x, p_y, p_z) &= \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{E_K + U(x, y, z)}{\theta}} d\vec{p} d\vec{r} = \\ &= \frac{1}{Z_0} e^{-\frac{E(\vec{r}, \vec{p})}{\theta}} d\vec{r} d\vec{p}, \end{aligned} \quad (59.11)$$

де $d\vec{r} d\vec{p} = dx dy dz dp_x dp_y dp_z$, $E_K + U(x, y, z) = E(\vec{p}, \vec{r})$ - повна енергія молекули одноатомного газу.

§60. Класична статистика Максвелла-Больцмана для ідеального газу

Розглянемо ідеальний газ, який знаходиться в стані термодинамічної рівноваги. Введемо для такого газу фазовий простір для однієї частинки, який називають μ -простором. Зрозуміло, що такий фазовий простір 6-ти вимірний, оскільки для однієї частинки, яку вважаємо матеріальною точкою, число ступенів вільності $s = 3$. Тоді на один стан у μ -просторі буде припадати об'єм фазового простору, що рівний h^3 . Або інакше кажучи, квант μ -простору має величину h^3 . Стан однієї частинки зображається в цьому фазовому μ -просторі однією фазовою точкою. Тоді стан системи з N частинок буде зображатись N фазовими точками, які будуть певним чином розподілені за станами у μ -просторі. Внаслідок теплового руху частинок їх фазові точки будуть якось переміщуватись у μ -просторі. Тоді стан кожної частинки, а значить і мікростан всього газу, буде змінюватись. Нагадаємо, що для того, щоб задати мікростан системи з N частинок, необхідно знати стан кожної частинки цієї системи. Це означає, що необхідно вказати число частинок в кожному з станів μ -простору, тобто, скільки фазових точок знаходиться в кожній комірці μ -простору.

Позначимо через n_k число частинок, які в даний момент часу знаходяться в k -му стані μ -простору (тобто, n_k - це число фазових точок, які в даний момент часу знаходяться в k -ій комірці μ -простору). Тоді мікростан всього газу буде задаватись сукупністю величин

$$n_1, n_2, \dots, n_k, \dots \quad (60.1)$$

Ці величини називаються *числами заповнень станів μ -простору*, які для частинок різної породи можуть приймати різні значення. Оскільки числа заповнень внаслідок теплового руху частинок весь час змінюються, то знайти їх миттєві значення практично неможливо. Тому дуже важливою характеристикою ідеального газу є середнє значення чисел заповнення, яке називається *функцією розподілу частинок за станами μ -простору*.

Знайдемо тепер середнє число частинок класичного ідеального газу, які перебувають в одному стані, тобто їх фазові точки знаходяться в одній комірці фазового μ -простору. Для цього врахуємо, що квант μ -простору має величину h^3 , тобто на один стан у μ -просторі припадає об'єм фазового простору $d\vec{p}d\vec{r} = dp_x dp_y dp_z dx dy dz = h^3$. Якщо енергія частинки в цьому стані $\mathcal{E}_k$, а середнє число частинок в цьому стані $\bar{n}_k$, то з виразу (57.3) отримаємо:

$$dN(\vec{r}\vec{p}) = NdW(\vec{r}\vec{p}) = \frac{N}{Z_0} e^{-\frac{E(\vec{r},\vec{p})}{\theta}} d\vec{r}d\vec{p} \quad (60.2)$$

та з урахуванням того, що $d\vec{p}d\vec{r} = dp_x dp_y dp_z dx dy dz = h^3$ і $dN(\vec{r}\vec{p}) = \bar{n}_k$, знаходимо:

$$\bar{n}_k = \frac{h^3}{Z_0} e^{-\frac{\mathcal{E}_k}{\theta}}. \quad (60.3)$$

Якщо зовнішніх полів немає ($U(x, y, z) = 0$), то з виразу (59.5) для Z_0 маємо:

$$\begin{aligned} Z_0 &= \iiint e^{-\frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m\theta}} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} \iiint dx dy dz = \\ &= V(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned} \quad (60.4)$$

Тоді для середнього числа частинок отримаємо:

$$\bar{n}_k = \frac{Nh^3}{V(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\mathcal{E}_k}{\theta}}. \quad (60.5)$$

Виходячи з відомих термодинамічних співвідношень, легко знайти хімічний потенціал одноатомного ідеального газу:

$$\mu = \theta \ln \frac{Nh^3}{V(2\pi m\theta)^{\frac{3}{2}}}. \quad (60.6)$$

Тобто

$$\frac{N h^3}{V(2\pi m \theta)^{\frac{3}{2}}} = e^{\frac{\mu}{\theta}}. \quad (60.8)$$

В результаті для функції розподілу отримаємо:

$$\bar{n}_k = e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}. \quad (60.9)$$

Цей вираз дає середнє число частинок класичного ідеального газу в стані з енергією ε_k , коли газ перебуває в стані термодинамічної рівноваги. Такий розподіл називають *розподілом Максвелла-Больцмана*.

Лекція 18. РОЗПОДІЛ БОЛЬЦМАНА

§61. Розподіл Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за координатами).

§62. Барометрична формула і експериментальне визначення сталої Больцмана.

[1. §6.3; 6. §49; 8. §IV.3]

§61. Розподіл Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за координатами)

Знайдемо тепер розподіл молекул ідеального газу за координатами. Отже, обчислимо ймовірність $dW(x_i, y_i, z_i)$ того, що координата довільної i -тої молекули одноатомного ідеального газу лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[x_i, x_i + dx_i]; \\ &[y_i, y_i + dy_i]; \\ &[z_i, z_i + dz_i]. \end{aligned}$$

Використовуючи результати попередніх параграфів, шукаючи ймовірність можна знайти, якщо проінтегрувати канонічний розподіл Гіббса за проекціями імпульсів всіх частинок крім i -тої. Оскільки отриманий розподіл буде справедливим не тільки для i -тої частинки, а і для довільної молекули. Тоді для ймовірності $dW(x, y, z)$ в результаті отримаємо:

$$dW(x, y, z) = C e^{-\frac{U(x, y, z)}{\theta}} dx dy dz, \quad (61.1)$$

де C - константа, яку можна знайти з умови нормування

$$C \iiint e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}} dx dy dz = 1. \quad (61.2)$$

Відповідно функція розподілу $\rho(x, y, z)$ даватиме *густину ймовірності* різних значень координат довільної молекули одноатомного ідеального газу:

$$\rho(x, y, z) = e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}}. \quad (61.3)$$

Функція (61.3) називається *розподілом Больцмана*.

Фізичний зміст розподілу Больцмана в тому, що величина $dW(x_i, y_i, z_i)$, яка визначається виразом (61.1), дає ймовірність того, що координата довільної молекули одноатомного ідеального газу лежать в межах:

$$\begin{aligned} &[x, x + dx]; \\ &[y, y + dy]; \\ &[z, z + dz]. \end{aligned}$$

Зауваження: розподіл Больцмана можна отримати, проінтегрувавши розподіл Максвелла-Больцмана за проєкціями імпульсу молекул газу.

Розглянемо деякі прості приклади застосування розподілу Больцмана. Введемо поняття концентрації частинок $n(x, y, z)$ в околі точки з координатами (x, y, z) . Якщо N - число частинок в системі, а $dN(x, y, z)$ - середнє число частинок, координати яких лежать у межах: $[x, x + dx]; [y, y + dy]; [z, z + dz]$, то концентрація частинок $n(x, y, z)$ в околі точки з координатами (x, y, z) зручно визначити за допомогою співвідношення:

$$n(x, y, z) = \frac{dN(x, y, z)}{dx dy dz} = \frac{dN(x, y, z)}{dV}. \quad (61.4)$$

Нагадаємо, що за означенням ймовірності:

$$dW(x, y, z) = \frac{dN(x, y, z)}{N}, \quad (61.5)$$

звідки

$$dN(x, y, z) = N dW(x, y, z). \quad (61.6)$$

Тоді для концентрації отримаємо вираз:

$$n(x, y, z) = C_1 N e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}} = C_2 e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}}, \quad (61.7)$$

де $C_2 = C_1 N$.

Зрозуміло, що константа C_2 дорівнює концентрації частинок в точці, де $U(x, y, z) = 0$. Якщо в початку координат $U(0,0,0) = 0$, то:

$$C_2 = n(0,0,0) = n_0. \quad (61.8)$$

В результаті для концентрації знаходимо:

$$n(x, y, z) = n_0 e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}}. \quad (61.9)$$

З цього виразу видно, що концентрація частинок буде більшою там, де їх потенціальна енергія менша.

Розглянемо тепер ідеальний газ, що знаходиться у рівновазі в однорідному полі сили тяжіння. Цій умові буде наближено задовольняти Земна атмосфера, оскільки на невеликих висотах поле сили тяжіння буде однорідним, а температуру можна вважати постійною. Зауважимо, що для двохатомних газів, з яких в основному складається Земна атмосфера, потенціальна енергія в полі сили тяжіння залежить від координат, центра тяжіння, як і для одноатомних. Якщо вісь Z направити вертикально в гору, то в даному випадку потенціальна енергія атома масою m буде описуватись виразом:

$$U(x, y, z) = mgz. \quad (61.10)$$

Тоді для концентрації молекул в однорідному полі сили тяжіння маємо:

$$n(x, y, z) = n_0 e^{-\frac{mgz}{\theta}}. \quad (61.11)$$

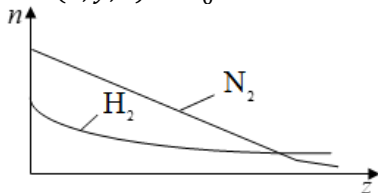


Рис. 51

З цього виразу видно, що концентрація легких газів (водню, гелію) за зростання висоти зменшується набагато повільніше, ніж концентрація важких газів (азоту, кисню). Тому зрозуміло, що починаючи з деяких висот, атмосфера буде складатись в основному з молекул легких газів, що і було доведено експериментальними дослідженнями (рис. 51).

Оскільки тиск ідеального газу пропорційний концентрації молекул (згідно з основними рівняннями молекулярно-кінетичної теорії), то тиск газу на висоті h буде описуватись виразом аналогічним до (61.11):

$$P(h) = P(0) e^{-\frac{mgh}{\theta}}, \quad (61.12)$$

де $P(0)$ - тиск газу на поверхні землі. Вираз (61.12) носить назву

барометричної формули. Барометрична формула показує, як зміниться тиск газу в залежності від висоти над поверхнею Землі.

В попередньому прикладі ми вважали поле сили тяжіння однорідним і не враховували його зміну під час віддалення від поверхні Землі. Оскільки маса атмосфери набагато менша маси планети, то потенціальна енергія молекули масою m в гравітаційному полі планети буде задаватись виразом:

$$U(x, y, z) = U(r) = -G \frac{Mm}{R + r}, \quad (61.13)$$

де $G = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{кг}^2$ - гравітаційна стала, M - маса планети, R - радіус планети, r - відстань від поверхні планети.

Зауваження: що за умови $r \ll R$ вираз (61.13) відразу переходить у (61.10).

Після підстановки цього значення потенціальної енергії в (61.9) для концентрації молекул на довільні відстані r від поверхні планети знаходимо:

$$n(r) = C e^{-\frac{U(x,y,z)}{\theta}} = C e^{G \frac{Mm}{(R+r)\theta}}. \quad (61.14)$$

Знайдемо тепер концентрацію газу земної атмосфери на нескінченно великій віддалі від поверхні Землі ($r \rightarrow \infty$)

$$n(\infty) = C e^0 = C \neq 0. \quad (61.15)$$

Отриманий результат дещо несподіваний. Він показує, що концентрація молекул земної атмосфери на нескінченно великій віддалі від поверхні землі є скінченою і відмінною від нуля (рис. 52).

Це означає, що земна атмосфера прямуючи до стану термодинамічної рівноваги, намагатиметься заповнити собою весь навколишній простір, тобто буде *розсіюватись*.

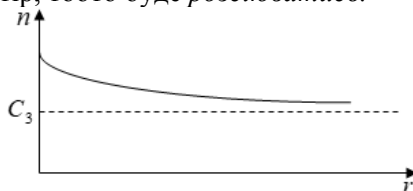


Рис. 52

Таким чином, виходячи з (61.13) зрозуміло, що в гравітаційному полі газ не може знаходитись в рівноважному стані. Доведемо це обчисливши константу нормування розподілу (61.14) з умови, що в повному стовпі атмосфери з площею поперечного перерізу 1 м^2 і нескінченною висотою є N_0 молекул:

$$\int_R^{\infty} n(r) 4\pi r^2 dr = 4\pi n(0) \int_R^{\infty} e^{\frac{a}{R+r}} r^2 dr = N_0. \quad (61.16)$$

Оскільки $a = G \frac{Mm}{\theta} > 0$, то інтеграл в останньому виразі на верхній границі буде розбігатись. Це означає, що в полі газ не може перебувати в рівноважному стані, тобто опис атмосфери на всій протяжності від поверхні Землі і до нескінченно далеких віддалей за допомогою розподілу Больцмана є досить наближеним та в граничних випадках (для $r \rightarrow \infty$) може приводити до парадоксальних результатів, через те, що скінчена кількість газу не може бути розподілена у нескінченному об'ємі скрізь з відмінною від нуля густиною. Отже, в гравітаційному полі газ не може перебувати у рівновазі і повинен неперервно розсіюватись в навколишній простір.

Зауваження: швидкість розсіювання атмосфери в навколишній космічний простір суттєво залежить від маси планети та температури її поверхні. За зменшення маси планети та збільшення температури її поверхні швидкість розсіювання атмосфери зростає. Саме цим пояснюється відсутність атмосфери на малих планетах, супутниках, наприклад, таких як Місяць.

§62. Барометрична формула і експериментальне визначення сталої Больцмана

Як уже говорилося вище, що барометрична формула лише приблизно описує зміну тиску з висотою, так як в дійсності атмосфера не знаходиться у рівноважному стані. Все ж таки ця формула дуже важлива, так як дає можливість провести ряд корисних оцінок і служить основою для інших більш точних співвідношень, що застосовуються для визначення висоти за тиском атмосфери.

Перрен запропонував використовувати барометричну формулу для експериментального визначення числового значення сталої Больцмана. Оскільки стала Больцмана пов'язана з молярною газовою сталою, відомою із дослідів з розрідженими газами і сталою Авогадро, то з досліду Перрена отримується значення сталої Авогадро.

Ідея цього чудового досліду дуже проста. Розподіл Больцмана, а відповідно, і барометрична формула справедлива для будь яких частинок, що знаходяться у тепловій рівновазі з навколишнім середовищем. Якщо вибрати частинки, що володіють великою

порівняно з молекулами масою, то за формулою

$$h_{\text{еф}} = \frac{kT}{m_0 g} = \frac{RT}{Mg} \quad (62.1)$$

ефективна висота, обернено пропорційна масі частинок, виявиться малою. Це дає великі переваги під час проведення досліду. По-перше, легше виміряти зміну концентрації, якщо зміна відбувається на відносно невеликих відстанях, а не так, як в атмосфері, де $h_{\text{еф}} \approx 9$ км. По-друге, легше забезпечити рівноважні умови, зокрема сталість температури, так як вони повинні мати місце у відносно невеликій області простору. В досліді Перрена у посудину з рідиною насипався порошок дуже малих частинок. Частинки можна розглядати як великі молекули, котрі під дією сили тяжіння розподілялися по висоті неоднорідно у відповідності з барометричною формулою. За допомогою мікроскопа підраховується число частинок, що знаходиться в полі зору поблизу дна посудини, а потім на деякій висоті від дна. У цьому випадку використовується властивість мікроскопа: в полі зору видно лише ті частинки, що розташовані у вузькій зоні поблизу фокальної площини. Відношення отриманих чисел за барометричною формулою дорівнює

$$\frac{n(z)}{n(0)} = e^{-\frac{m'gz}{kT}}, \quad (62.2)$$

де $m'g$ - вага частинки в рідині, тобто вага за обрахунками виштовхувальної сили Архімеда.

Із формули (62.2) випливає:

$$k = \frac{m'gz}{T} \ln \left(\frac{n(0)}{n(z)} \right). \quad (62.3)$$

Якщо відомі розміри частинок (радіус r) і густина ρ речовини з якої вони складаються, а також густина ρ_0 рідини, то

$$m'g = \frac{4}{3} \pi r^3 (\rho - \rho_0) g. \quad (62.4)$$

Знаючи температуру T рідини, за експериментально знайденому значенню відношення $\frac{n(0)}{n(z)}$ для вибраної висоти z визначають k .

З досліду Перрена для сталої Больцмана отримано значення $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К, звідки для сталої Авогадро слідує $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$.

Лекція 19. ЗАКОН РІВНОМІРНОГО РОЗПОДІЛУ ЕНЕРГІЇ ЗА СТУПЕНЯМИ ВІЛЬНОСТІ В КЛАСИЧНІЙ СТАТИСТИЦІ

§63. Теорема про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності.

§64. Застосування теореми про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності.

[1. §6.8; 2. §4.3; 5. §6.4; 6. §51, §52; 7. §45; 8. §IV.5]

§63. Теорема про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності

Відомо, що середня кінетична енергія молекули одноатомного ідеального газу $\bar{E}_1 = \frac{3}{2}kT$, а молекули двохатомного ідеального газу - $\bar{E}_2 = \frac{5}{2}kT$. Виявляється, що цей результат є наслідком деякого загального співвідношення, яке можна отримати за допомогою канонічного розподілу Гіббса. Виведемо це співвідношення.

Теорема. Якщо $H(q, p)$ функція Гамільтона довільної класичної системи і α - довільна координата або імпульс, що задовольняє умові:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \pm\infty} H(q, p) = +\infty, \quad (63.1)$$

то тоді має місце таке співвідношення:

$$\alpha \cdot \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} = \theta = kT. \quad (63.2)$$

Зауваження: для імпульсів умова (63.1) завжди виконується, а для координати може і не виконуватись.

Доведення. З означення середнього

$$\alpha \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} = \frac{1}{N! Zh^s} \int \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dq dp. \quad (63.3)$$

Вираз (63.3) запишемо дещо в іншому вигляді:

$$\alpha \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} = \frac{1}{N! Zh^s} \int \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\Gamma. \quad (63.4)$$

Виділимо в інтегралі (63.4) інтеграл по α :

$$\alpha \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} = \frac{1}{N! Zh^s} \int d\Gamma' \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha}_I, \quad (63.5)$$

де $dq dp = d\Gamma = d\alpha d\Gamma'$.

Розглянемо окремо інтеграл по α :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha. \quad (63.6)$$

Скористаємося тим, що

$$d\left(e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}}\right) = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha. \quad (63.7)$$

У виразі (63.6) інтегрування проведемо частинами:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha &= -\theta \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha d\left(e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}}\right) = \\ &= -\theta \alpha e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \theta \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha. \end{aligned} \quad (63.8)$$

Перший інтеграл дорівнює нулю за умовою теореми, так як для $\alpha \rightarrow 0$ відповідно до умови теореми $\lim_{\alpha \rightarrow \pm\infty} H(q,p) = +\infty$, тоді перший доданок в правій частині дорівнює нулю. В результаті можемо записати:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha = \theta \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha. \quad (63.9)$$

Підставимо вираз (63.9) у вираз (63.5)

$$\alpha \frac{\partial \overline{H}}{\partial \alpha} = \frac{1}{N! Zh^S} \int d\Gamma' \cdot \theta \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\alpha. \quad (63.10)$$

Об'єднаємо ці два інтеграли в один, отримаємо:

$$\alpha \frac{\partial \overline{H}}{\partial \alpha} = \theta \frac{1}{N! Zh^S} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} d\Gamma \quad (63.11)$$

або

$$\alpha \frac{\partial \overline{H}}{\partial \alpha} = \theta \frac{1}{N! Zh^S} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dq dp. \quad (63.12)$$

Так як у формулі (63.12) величина

$$\frac{1}{N! Zh^S} \int e^{-\frac{H(q,p)}{\theta}} dq dp = 1 \quad (63.13)$$

є нормований інтеграл, то отримаємо:

$$\alpha \frac{\partial \overline{H}}{\partial \alpha} = \theta = kT. \quad (63.12)$$

Теорему доведено.

§64. Застосування теореми про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності

Нехай є довільна система газ або рідина. Очевидно, що функцію Гамільтона в цьому випадку можна записати у вигляді:

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} + U(q), \quad (64.1)$$

де $U(q)$ - потенціальна енергія взаємодії молекул речовини та їх потенціальна енергія в полі зовнішніх сил.

Тоді, очевидно, що довільну проекцію імпульсу можна вибрати за α . Наприклад, $p_{ix} \equiv \alpha$. На прикладі цієї проекції застосуємо теорему про рівнорозподіл, причому врахувавши, якщо $p_{ix} \rightarrow \pm\infty$, то $p_{ix}^2 \rightarrow +\infty$. Отже, $H(q, p) = \pm\infty$, тоді

$$\alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} = p_{ix} \frac{\partial H}{\partial p_{ix}} = p_{ix} \frac{p_{ix}}{m} = \frac{p_{ix}^2}{m}. \quad (64.2)$$

За умовою теореми

$$\alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} = \overline{\frac{p_{ix}^2}{m}} = \theta = kT. \quad (64.3)$$

Тоді можна записати:

$$\overline{\frac{p_{ix}^2}{m}} = kT. \quad (64.4)$$

Таким чином, для середнього значення кінетичної енергії молекули, що припадає на один поступальний ступінь вільності, маємо:

$$\overline{\frac{p_{ix}^2}{2m}} = \frac{kT}{2}. \quad (64.5)$$

Отже, з виразу (64.5) слідує, що середня кінетична енергія поступального руху частинки не залежить від маси частинки та інших її характеристик, а визначається лише температурою систем. Хоча звичайна енергія поступального руху частинки буде залежати від маси частинки й імпульсу тощо, а усереднена енергія, як видно визначається тільки температурою системи.

Тобто з виразу (64.5) випливає, що середнє значення кінетичної енергії молекули, яка припадає на один поступальний ступінь вільності дорівнює $\frac{kT}{2}$, тобто визначається тільки абсолютною температурою.

Лема. На кожний квадратний член функції Гамільтона припадає

середня енергія, що дорівнює $\frac{kT}{2}$.

Доведення. Виділимо із функції Гамільтона довільний квадратичний член за координатою або імпульсом. Позначимо його $\alpha\alpha^2$, тобто:

$$H(q, p) = \alpha\alpha^2 + H'. \quad (64.6)$$

Причому H' не залежить від α . Необхідно довести, що

$$\overline{\alpha\alpha^2} = \frac{kT}{2}. \quad (64.7)$$

За умовою теореми необхідно розрахувати величину:

$$\frac{\partial H}{\partial \alpha} = 2\alpha. \quad (64.8)$$

Тоді скористаємося результатами доведеної теореми:

$$\alpha \frac{\partial H}{\partial \alpha} = \overline{\alpha 2\alpha} = \overline{2\alpha\alpha^2} = \theta = kT \quad (64.9)$$

або

$$\overline{\alpha\alpha^2} = \frac{\theta}{2} = \frac{kT}{2}. \quad (64.10)$$

Доведена лема дає можливість безпосередньо розрахувати середню енергію багатьох класичних систем (внутрішню енергію класичних систем).

Класичний одноатомний газ.

Функція Гамільтона такого газу має вигляд:

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} \quad (64.11)$$

У виразі (64.11) на кожний член, що відповідає одній молекулі, припадає три $3N$ квадратних доданки за проекціями імпульсу. На кожний з них припадає середня кінетична енергія $\frac{kT}{2}$. Отже, середня кінетична енергія одноатомної молекули

$$\bar{E} = \frac{3}{2}kT. \quad (64.12)$$

З формули (64.11) слідує, що на кожну поступальну ступінь вільності припадає середня енергія

$$\bar{E}_{\text{пост}} = \frac{kT}{2}. \quad (64.13)$$

Тепер легко підрахувати внутрішню енергію такого одноатомного газу

$$U = \bar{H} = 3N \frac{kT}{2} = \frac{3}{2} NkT. \quad (64.14)$$

Зауваження: кожену молекулу одноатомного ідеального газу ми вважали матеріальною точкою.

Двохатомний газ.

Розглянемо модель молекули двохатомного ідеального газу, яку ми будемо представляти у вигляді двох матеріальних точок, що розташовані на постійній віддалі одна від другої (це так звана гантелеподібна модель). Для такої молекули можливі три поступальні ступені вільності, що зв'язані з рухом її центра мас, а також має дві обертальні ступені вільності.

Обертання навколо осей типу ab та $a'b'$ (обертання навколо осі mn є фізичним процесом) (рис. 53). Тоді функція Гамільтона для однієї молекули може бути записана у вигляді:

$$H_i(q, p) = \underbrace{\frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2M}}_{\text{Кінетична енергія поступального руху центра мас молекули}} + \underbrace{\frac{L_z^2}{2I} + \frac{L_y^2}{2I}}_{\substack{\text{Проекції моменту імпульсу молекули, що відіграють роль узагальнених імпульсів по відношенню до узагальнених координат кутів повороту}}}, \quad (64.15)$$

де I - момент інерції молекули.

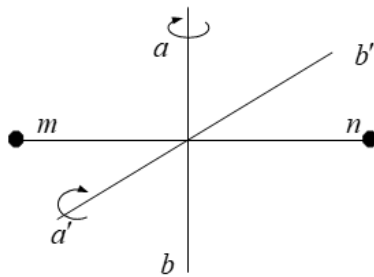


Рис. 53

З виразу (64.15) видно, що енергія двохатомного газу містить п'ять квадратичних членів. Отже, середня енергія двохатомної молекули

$$\bar{E} = 5 \frac{kT}{2}. \quad (64.16)$$

Таким чином, на кожен ступінь поступального руху молекули

припадає середня енергія, що рівна $\frac{kT}{2}$.

Отже, внутрішня енергія двохатомного газу

$$U = \bar{H} = \frac{5}{2} NkT. \quad (64.17)$$

Особливо зазначимо, що на кожний обертальний ступінь вільності молекули припадає середня енергія, що дорівнює $\frac{kT}{2}$. Дуже важливим тут є саме те, що у випадку, коли кінетична енергія будь-якого ступеня вільності квадратичного виражається через відповідну даному ступеню вільності компоненту імпульсу, то середнє значення кінетичної енергії, яке припадає на будь-який ступінь вільності, завжди буде дорівнювати $\frac{kT}{2}$.

Коливальний рух.

Функція Гамільтона одномірного лінійного гармонічного осцилятора має такий вигляд:

$$H_{\text{осц}} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}. \quad (64.18)$$

Вона містить два квадратичних члена: один - за проекцією імпульсу, другий - за координатою. На кожен з них припадає середня енергія, що дорівнює $\frac{kT}{2}$.

З виразу (64.18) видно, що середня енергія одномірного гармонічного осцилятора така:

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{осц}} = \frac{kT}{2} + \frac{kT}{2} = kT. \quad (64.19)$$

Тобто на одну ступінь вільності коливального руху припадає середня енергія що дорівнює kT .

Висновок. На кожному ступінь вільності поступального та обертального руху припадає середня енергія що дорівнює $\frac{kT}{2}$, а на кожному ступінь вільності коливального руху припадає середня енергія kT . Дуже важливо, що ця середня енергія не залежить від математичних характеристик молекули, а визначається тільки температурою системи.

В класичній механіці кінетична енергія поступального і обертального рухів завжди квадратично виражається через імпульси (або узагальнені імпульси). Тому середнє значення *кінетичної енергії* молекули класичного газу

$$\overline{E} = i \frac{kT}{2}, \quad (64.20)$$

де i - число поступальних та обертальних ступенів вільності молекули.

Зрозуміло, що для розрахунку середнього значення *повної енергії* молекули необхідно врахувати ще внесок коливальних ступенів вільності.

Лекція 20. ТЕОРІЯ ТЕПЛОЄМНОСТІ ГАЗІВ

§65. Теплоємність як функція процесу.

§66. Зв'язок між молярними теплоємностями C_p і C_v .

§67. Класична теорія теплоємності газів.

§68. Квантова теорія теплоємності.

§69. Застосування статистичної суми для розрахунку теплоємності за станом однієї частинки.

§70. Обговорення результатів розрахунку теплоємності газів.

[1. §6.4, §6.6, §6.7, §6.9, §6.10; 2. §4.3; 4. §9; 5. §6.5; 6. §53-§55; 7. §46, §47; 8. §IV.4, IV.6, §IV.7]

§65. Теплоємність як функція процесу

За означенням теплоємність системи C в деякому процесі визначається відношенням кількості теплоти δQ , яку отримає система в цьому процесі, до зміни температури системи dT , тобто

$$C = \frac{\delta Q}{dT}. \quad (65.1)$$

Через те, що δQ - функція процесу, то і теплоємність системи має зміст тільки по відношенню до того чи іншого процесу. У зв'язку з цим теплоємність однієї і тієї ж системи може приймати різні значення в залежності від характеру процесу. Розглянемо приклади різних процесів та знайдемо теплоємність системи в цих процесах.

1. Нехай система отримує кількість теплоти $\delta Q > 0$, але одночасно розширюється виконуючи роботу. Нехай процес є ізотермічним, тобто $dT = 0$. Тоді теплоємність системи $C = +\infty$.

2. Нехай над системою виконується робота, але система одночасно віддає кількість теплоти $\delta Q < 0$ холодильнику, але процес є ізотермічним $dT = 0$. Тоді теплоємність системи $C = 0$.

3. Газ одержує кількість теплоти $\delta Q > 0$, але настільки інтенсивно виконує роботу, що його температура понижується, тобто $T < 0$. Тоді в цьому процесі теплоємність системи $C < 0$.

4. Розглянемо адіабатичний процес, коли $\delta Q = 0$, а $dT \neq 0$. Тоді теплоємність системи $C = 0$.

Таким чином, в різних процесах теплоємність системи дійсно може мати різні значення:

$$-\infty < C < +\infty. \quad (65.2)$$

Нагадаємо поняття *питомої теплоємності* $C_{\text{пит}}$ та *молярної теплоємності* $C_{\text{мол}}$.

Питома теплоємність $C_{\text{пит}}$ чисельно рівна кількості теплоти, яку необхідно надати 1 кг речовини для того, щоб змінити її температуру на 1 К

$$C_{\text{пит}} = \frac{\delta Q}{m dT}. \quad (65.3)$$

Питома теплоємність $C_{\text{пит}}$, вимірюється у Дж/кг · К.

Молярна теплоємність $C_{\text{мол}}$ чисельно дорівнює кількості теплоти, яку необхідно надати одному молю речовини для того, щоб змінити її температуру на 1 К

$$C_{\text{мол}} = \frac{\delta Q}{\nu dT}. \quad (65.4)$$

Молярна теплоємність $C_{\text{мол}}$ вимірюється у Дж/моль · К.

Зв'язок між теплоємністю C , питомою теплоємністю $C_{\text{пит}}$ та молярною теплоємністю $C_{\text{мол}}$:

$$C_{\text{пит}} = \frac{C}{m}; \quad C_{\text{пит}} = \frac{C_{\text{мол}}}{M}; \quad C_{\text{мол}} = \frac{C}{\nu}, \quad (65.5)$$

де m - маса речовини; $\nu = \frac{m}{M}$ - кількість речовини, що вимірюється у молях.

§66. Зв'язок між молярними теплоємностями C_p і C_v

Отримаємо деякі співвідношення для теплоємності. Враховуючи перший закон термодинаміки записаний у вигляді:

$$\delta Q = dU + PdV. \quad (66.1)$$

Оскільки

$$C = \frac{\delta Q}{dT}, \quad (66.2)$$

то

$$\delta Q = C dT. \quad (66.3)$$

З врахуванням виразу (66.3) перший закон термодинаміки перепишеться:

$$CdT = dU + PdV. \quad (66.4)$$

Поділимо ліву і праву частину виразу (66.4) на dT , тоді для теплоємності системи C отримаємо:

$$C = \frac{dU}{dT} + P \frac{dV}{dT}. \quad (66.5)$$

Якщо вважати, що незалежні змінні об'єм V , температура T , то враховуючи вираз для диференціала $dU(V, T)$:

$$dU(V, T) = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT. \quad (66.6)$$

Для теплоємності системи C знаходимо:

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \frac{dT}{dT} + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T \frac{dV}{dT} + P \frac{dV}{dT} \quad (66.7)$$

або

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V + \left(\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + P\right) \frac{dV}{dT} \quad (66.8)$$

З цього виразу видно, що теплоємність системи C може набувати різних значень через те, що параметри V, T - незалежні, а значить і їх диференціали dV і dT - теж незалежні, отже, їх відношення $\frac{dV}{dT}$ може мати різні значення в залежності від процесу.

У статистичній фізиці найчастіше користуються теплоємністю за сталого тиску C_P та сталого об'єму C_V . З виразу (66.8) для теплоємності за сталого об'єму C_V знаходимо:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V. \quad (66.9)$$

Тоді для теплоємності за сталого тиску C_P маємо:

$$C_P = \left(\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + P\right) \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P. \quad (66.10)$$

Вираз (66.10) встановлює зв'язок між теплоємностями C_P та C_V . Для ідеального газу, коли $U = \frac{3}{2}NkT$, $PV = NkT$, то ця формула має простіший вигляд, так як $\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = 0$, а $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{Nk}{P}$:

$$C_P = C_V + (0 + P) \frac{Nk}{P} \quad (66.11)$$

або

$$C_P = C_V + Nk. \quad (66.12)$$

Для молярних теплоємностей, якщо взяти 1 моль газу, то $N = N_A$ і $N_A k = R = 8,31 \text{ Дж/К} \cdot \text{моль}$ - універсальна газова стала, отримаємо:

$$C_p^{\text{мол}} = C_v^{\text{мол}} + R. \quad (66.13)$$

Формула (66.13) є *рівняння Роберта Майєра* з яким знайомилися у курсі загальної фізики.

Зв'язок між теплоємностями C_p і C_v можна встановити й іншим способом. Для цього скористаємося раніше відомим співвідношенням:

$$dU = TdS + PdV + \sum_{i=1}^n A_i da_i. \quad (66.14)$$

Поділимо праву і ліву частину цього рівняння на dT і розглянемо це відношення за постійного об'єму $V = \text{const}$ для простої системи (коли всі $a_i = 0$)

$$\left(\frac{dU}{dT}\right)_V = T \left(\frac{dS}{dT}\right)_V. \quad (66.15)$$

Скориставшись виразом для другого закону термодинаміки

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad (66.16)$$

запишемо:

$$\left(\frac{\delta Q}{dT}\right)_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V. \quad (66.17)$$

До виразу (66.17) врахуємо означення теплоємності

$$C = \frac{\delta Q}{dT}, \quad (66.18)$$

отримаємо:

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V. \quad (66.19)$$

Запишемо аналогічне співвідношення для ентальпії:

$$dH = TdS + VdP - \sum_{i=1}^n A_i da_i. \quad (66.20)$$

Поділимо праву і ліву частину цього рівняння на dT і розглянемо це відношення за постійного об'єму $P = \text{const}$ для простої системи (коли всі $a_i = 0$)

$$\left(\frac{dH}{dT}\right)_P = T \left(\frac{dS}{dT}\right)_P. \quad (66.21)$$

Скориставшись як і в попередньому випадку, виразом для

другого закону термодинаміки та означенням теплоємності, отримаємо:

$$\left(\frac{\delta Q}{dT}\right)_P = \left(\frac{dH}{dT}\right)_P. \quad (66.22)$$

Тоді

$$C_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P. \quad (66.22)$$

Продиференціювавши формули для внутрішньої енергії у вигляді:

$$U = \frac{3}{2}NkT \quad (66.23)$$

та ентальпії

$$H = \frac{5}{2}NkT \quad (66.24)$$

у відповідності з виразами для теплоємностей C_P та C_V , остаточно знаходимо:

$$C_P = \frac{5}{2}Nk; \quad C_V = \frac{3}{2}Nk. \quad (66.25)$$

Якщо розглянути 1 моль газу, коли $N = N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ - число Авогадро, то для різниці молярних теплоємностей отримаємо, як і раніше, *рівняння Роберта Майєра*:

$$C_P^{\text{мол}} - C_V^{\text{мол}} = N_A k = R, \quad (66.26)$$

де $R = 8,31$ Дж/К · моль - універсальна газова стала.

Із цього рівняння видно, що для одного моля ідеального газу $C_P > C_V$ на величину R . Це свідчить про те, що для ізобарного процесу кількість теплоти, яку дістає ідеальний газ, іде не тільки на збільшення внутрішньої енергії, а й на виконання роботи в процесі розширення газу.

§67. Класична теорія теплоємності газів

Як відомо, що знаючи залежність внутрішньої енергії від температури можна легко розрахувати теплоємність газу. З попереднього параграфу видно, що внутрішню енергію будь-якого газу можна записати у вигляді:

$$U = \frac{i}{2}NkT. \quad (67.1)$$

Причому i - це число степеней вільності молекули цього газу. Отже, для теплоємності (молярної) газу C_V можна відразу отримати:

$$C_V^{\text{мол}} = \frac{i}{2}N_A k = \frac{i}{2}R. \quad (67.2)$$

З виразу (67.2) слідує, що теплоємність класичного газу визначається тільки числом ступенів вільності і не залежить від температури.

Теплоємність одноатомних газів.

Молекулярна теплоємність одноатомних газів виражена в несистемних одиницях

$$C_V \approx 3 \frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{К}},$$

а відношення

$$\frac{C_P}{C_V} = \frac{\frac{3}{2}R + R}{\frac{3}{2}R} = 1,6(6).$$

Теплоємність двохатомних газів.

Виражена у несистемних одиницях теплоємність двохатомних газів має вигляд:

$$C_V \approx 5 \frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{К}},$$

$$\frac{C_P}{C_V} = \frac{\frac{5}{2}R + R}{\frac{5}{2}R} = 1,4.$$

Дуже цікаво відмітити, що теплоємність C_V виражена у несистемних одиницях чисельно співпадає з числом ступенів вільності молекули. Перевірка отриманих теоретичних результатів показала, що в широкому діапазоні температур класична теорія теплоємності добре узгоджується з експериментом, але під час порівняння були виявленні деякі розбіжності. Продемонструємо їх за допомогою таблиць:

- 1) одноатомний газ $\frac{C_P}{C_V} = 1,6$;
- 2) двохатомний газ $\frac{C_P}{C_V} = 1,4$.

Таблиця 1

Газ	$T, \text{К}$	$\frac{C_P}{C_V}$
H_2	250	1,407
Hg	527	1,666
N_2	293	1,398
O_2	293	1,398

Виявляється, що співпадання теоретичних результатів з експериментальними спостерігається тільки в певному температурному діапазоні.

Приведемо тепер таблицю теплоємності водню в залежності від температури. Причому теплоємність C_V будемо вимірювати у несистемних одиницях: $C_V[\frac{\text{кал}}{\text{К} \cdot \text{моль}}]$. Це робиться виключно для зручності. Оскільки для одноатомних газів у яких число ступенів вільності $i = 3$:

$$C_{V(1)} \approx 3 \frac{\text{кал}}{\text{К} \cdot \text{моль}};$$

для двохатомних газів, у яких $i = 5$, теплоємність

$$C_{V(2)} \approx 5 \frac{\text{кал}}{\text{К} \cdot \text{моль}}.$$

Отже, теплоємність виражена в одиницях $[\frac{\text{кал}}{\text{К} \cdot \text{моль}}]$ для будь-якого газу буде співпадати з числом ступенів вільності його молекул.

Таким чином, з приведеної таблиці 2 видно, що класична теорія теплоємностей далеко не завжди співпадає з експериментальними результатами. Більше того, класична теорія не може пояснити залежність теплоємності від температури і тим більше залежить від числа степенів вільності. Крім цих недоліків, класична теорія теплоємностей газів, недосконала, ще й тому, що врахування нових ступенів вільності молекул, тобто уточнення моделей приводить до погіршення теоретичних даних з експериментом.

Таблиця 2

**Деякі значення теплоємності за різних температур
для водню (H_2)**

T, K	$C \left(\frac{\text{кал}}{\text{К} \cdot \text{моль}} \right)$	i
35	2,98	} ≈ 3
100	3,10	
290	4,9	} ≈ 5
600	5,08	
1800	5,92	} ≈ 6
2000	6,06	
2500	6,4	

Згідно з класичною теорією газу

$$C_V = \frac{i}{2} R,$$

де i - число ступенів вільності.

Тобто, якщо наприклад, розглянути двоухатомну молекулу, то для неї $i = 5$ і в цьому припущенні в певному температурному діапазоні теоретичні результати непогано співпадають з експериментом. Але в двоухатомній молекулі можлива ще одна ступінь вільності - коливна. Саме в цьому сенсі ми кажемо, що покращення моделі веде до погіршення результатів. Всі ці та інші недоліки розглядаються в квантовій теорії теплоємностей газів.

§68. Квантова теорія теплоємності

Для розрахунку теплоємності C_V ми використовували формулу:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (68.1)$$

де U - внутрішня енергія системи.

Отже, для того, щоб точно розраховувати теплоємність газів необхідно обчислити внутрішню енергію газу. Внутрішня енергія знаходиться з виразу:

$$U = \theta^2 \frac{\partial (\ln Z_{\text{KB}})}{\partial \theta}, \quad (68.2)$$

де Z_{KB} - статистична сума, яку можна обчислити, знаючи всі можливі значення енергії системи E_n .

Видно, що для обчислення внутрішньої енергії треба обчислити статистичну суму системи:

$$Z_{\text{KB}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{\theta}}. \quad (68.3)$$

Отже, для цього розрахунку необхідно знати, які можливі значення енергії приймає система, тобто необхідно знати енергетичний спектр системи. Оскільки точні значення про енергетичний спектр є для невеликого числа системи, то подальший аналіз ми проведемо лише на якісному рівні.

Запишемо повну внутрішню енергію газу в розрахунку на одну молекулу у вигляді суми енергій за різними ступенями вільності, тобто

$$U = U_{\text{пост}} + U_{\text{оберт}} + U_{\text{колив}} + U_{\text{внутр}}. \quad (68.4)$$

Ми нехтуємо крім одних ступенів вільності іншими. Тоді сумарна теплоємність газу в розрахунках на одну молекулу

(диференціюючи) може бути записана у вигляді:

$$C_V = C_{V\text{пост}} + C_{V\text{оберт}} + C_{V\text{колив}} + C_{V\text{внутр}}, \quad (68.5)$$

$$\text{де } C_{V\text{пост}} = \frac{\partial U_{\text{пост}}}{\partial T}, C_{V\text{оберт}} = \frac{\partial U_{\text{оберт}}}{\partial T}, C_{V\text{колив}} = \frac{\partial U_{\text{колив}}}{\partial T}, C_{V\text{внутр}} = \frac{\partial U_{\text{внутр}}}{\partial T}.$$

З співвідношення (68.5) видно, що сумарна теплоємність газу складається із внесків у теплоємність, які вносять різні ступені вільності. Наше завдання буде полягати в тому, щоб визначити коли і за яких умов та чи інша ступінь вільності буде давати внесок у теплоємність.

Квантування енергії.

Основна ідея квантової теорії теплоємності полягає в тому, що енергія, яка зв'язана з різними ступенями вільності квантується. Причому для кожного типу руху величина кванта різна (рис. 54) ($E_{\text{пост}}, E_{\text{оберт}}, E_{\text{колив}}, E_{\text{внутр}}$).

З виразу

$$C_V^{(i)} = \left(\frac{\partial U_i}{\partial T} \right)_V$$

видно, що дана ступінь вільності не буде робити внеску у теплоємність тільки тоді, коли внутрішня енергія не буде залежати від температури

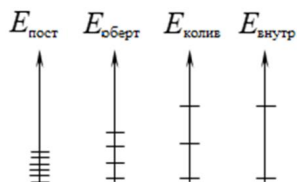


Рис. 54

$$U_i \neq U_i(T).$$

При достатньо низькій температурі система буде перебувати на найнижчому енергетичному рівні. Внутрішня енергія, що зв'язана з цією ступеню вільності не буде залежати від температури. Саме в цьому випадку ця ступінь вільності не буде давати внесок у теплоємність. Під час зростання температури система може по даній ступені вільності перейти на вищий рівень у збуджений стан. В цьому випадку внутрішня енергія стане функцією температури і отже, саме в цей момент дана ступінь вільності почне давати внесок у теплоємність тільки за температур, що задовольняють умову:

$$kT \cong \Delta E_{21}^{(i)}, \quad (68.6)$$

$$\Delta E_{21}^{(i)} = E_2^{(i)} - E_1^{(i)}. \quad (68.7)$$

Виходячи із виразу (65.6), можна ввести так звану критичну температуру

$$T_{\text{кр}}^{(i)} = \frac{\Delta E_{21}^{(i)}}{k}. \quad (68.8)$$

Це температура, починаючи з якої дана ступінь вільності буде

збуджуватись і давати внесок у теплоємність. Розрахуємо тепер критичну температуру для різних ступенів вільності. Причому за температури $T \ll T_{\text{кр}}^{(i)}$ система буде перебувати на найнижчому енергетичному рівні за даною ступеню вільності, тобто вона буде перебувати на енергетичному рівні $E_1^{(i)}$ та буде не збуджена. Тоді внутрішня енергія системи, що пов'язана з цим ступенем вільності не буде залежати від температури: $U_i \neq f(T)$. Отже, дана ступінь вільності буде не збудженою і не буде давати внесок у теплоємність

$$C_V^{(i)} = \frac{C_V^{(i)}}{N} = \frac{1}{N} \frac{\partial U_1}{\partial T} = 0. \quad (68.9)$$

При температурах $T \geq T_{\text{кр}}^{(i)}$, за цим i -тим ступенем система збуджується та переходить на вищий енергетичний рівень $E_2^{(i)}$. Починаючи з цієї температури, внутрішня енергія системи, що пов'язана з цим ступенем вільності починає залежати від температури $U_i = f(T)$. Тому даний ступінь вільності почне давати внесок у теплоємність:

$$C_V^{(i)} = \frac{C_V^{(i)}}{N} = \frac{1}{N} \frac{\partial U_1}{\partial T} \neq 0. \quad (68.10)$$

Якщо температура досягне таких значень, що $T \gg T_{\text{кр}}^{(i)}$, то цей внесок у теплоємність можна розрахувати класичними методами. На одну поступальну і на одну обертальну ступінь вільності буде припадати енергія в розрахунку на одну молекулу $C_V^{(\text{пост})} = C_V^{(\text{оберт})} = \frac{k}{2}$. Та на одну коливну в розрахунку на одну молекулу - $C_V^{(\text{колив})} = k$.

Для розрахунку критичної температури поступального руху, ми розглянемо рух частинки в тривимірній потенціальній ямі. А для розрахунку критичної температури обертального руху ступенів, ми розглянемо сферичний ротатор. І для розрахунку критичної температури коливального руху - лінійний гармонічний осцилятор.

Розрахуємо критичну температуру для кожної ступені вільності у поступальному русі.

Поступальні ступені вільності.

Розглянемо рух частинки масою m у тривимірній потенціальній ямі. З розв'язку рівняння Шредінгера слідує, що можливі значення енергії задаються співвідношенням:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right), \quad (68.11)$$

де L_1, L_2, L_3 - лінійні розміри потенціальної ями; n_1, n_2, n_3 - додатні цілі числа (квантові числа) для частинки в потенціальній ямі, що нерівні одночасно нулю.

Нехай параметри ями такі, що $n_1 = 1$; $n_2 = n_3 = 0$, а перший збуджений рівень визначається співвідношеннями: $n_1 = 2$; $n_2 = n_3 = 0$. Оцінімо тепер критичну температуру збудження ступенів вільності між енергетичними рівнями

$$T_{\text{кр}}^{(\text{пост})} = \frac{\Delta E_{21}}{k} = \frac{E_{2,0,0} - E_{1,0,0}}{k} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL_1^2 k}. \quad (68.12)$$

Виконаємо числові обрахунки $T_{\text{кр}}^{(\text{пост})}$ для найлегшого газу - водню, коли $m \approx 10^{-27}$ кг, а $L_1 = 1$ см = 0,01 м:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{пост})} \approx \frac{3}{2} \frac{3,14^2 \cdot (1,1 \cdot 10^{-34})^2}{10^{-27} (10^{-2})^2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} \approx 10^{-13} \text{ К}.$$

Отже, критична температура для поступального руху

$$T_{\text{кр}}^{(\text{пост})} \approx 10^{-13} \text{ К}.$$

Висновок. Для всіх реальних температур виконується умова $T \gg T_{\text{кр}}^{(\text{пост})}$. Отже, поступальна ступінь вільності за всіх температур дає внесок у теплоємність. Причому, цей внесок можна розраховувати класичними методами, так що на кожен ступінь вільності припадає середня енергія

$$\bar{E} = \frac{kT}{2}.$$

У цілому розрахунку на одну молекулу поступальної ступені вільності дають внесок у теплоємність, що дорівнює

$$C_V^{(\text{пост})} = \frac{k}{2}.$$

Дана формула дає можливість визначити теплоємність для одноатомних ідеальних газів.

Обертальні ступені вільності.

Довільна молекула може приймати участь в обертанні навколо трьох взаємно перпендикулярних осей. Розглянемо енергетичний спектр, пов'язаний з обертанням навколо певної осі. Згідно з основними результатами квантової механіки, енергія обертального руху, тобто енергія сферичного ротора - тіла, що здійснює обертальний рух навколо певної осі, - *квантування* у відповідності з виразом

$$E_l = \frac{\hbar}{2I} l(l+1), \quad (68.13)$$

де l - орбітальне квантове число ($l = 0, 1, 2, \dots$); I - момент інерції молекули відносно вибраної осі обертання.

Тоді $E_{l_0}^{(\text{оберт})} = \frac{\hbar^2}{I}$, і критична температура збудження даного обертового ступеня вільності $T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}$ визначатиметься за формулою:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})} = \frac{\hbar^2}{Ik}. \quad (68.14)$$

Для того, щоб знайти числове значення критичної температури збудження певного обертового ступеня вільності, необхідно розрахувати момент інерції I молекули відносно вибраної осі обертання, який залежить від структури молекул.

1. Одноатомні молекули.

З точки зору квантової механіки кожна молекула одноатомного ідеального газу представляє собою квантовий сферичний ротатор. Квантово-механічна модель одноатомної молекули представлена на рисунку 55.

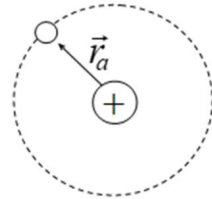


Рис. 55

Оцінимо приблизно момент інерції одноатомного газу, що визначається формулою:

$$I = \frac{2}{5} (M_{\text{я}} R_{\text{я}}^2 + m_{\text{е}} r_{\text{а}}^2), \quad (68.15)$$

де $M_{\text{я}}$ - маса ядра; $R_{\text{я}}$ - радіус ядра; $m_{\text{е}}$ - маса електрона; $r_{\text{а}}$ - радіус атома.

Для числової оцінки моменту інерції скористаємося параметрами атома водню: $M_{\text{я}} \approx 10^{-27}$ кг; $R_{\text{я}} \approx 10^{-15}$ м; $m_{\text{е}} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг; $r_{\text{а}} \approx 10^{-10}$ м. Після аналізу даних у порівнянні з формулою (68.15) бачимо, що момент інерції ядра $M_{\text{я}} R_{\text{я}}^2$ набагато менший момента інерції електрона в атомі $m_{\text{е}} r_{\text{а}}^2$. Тому формула (68.15) прийме вигляд:

$$I \approx \frac{2}{5} m_{\text{е}} r_{\text{а}}^2. \quad (68.16)$$

Після підстановки даних у формулу (68.16), отримаємо:

$$I \approx 10^{-50} \text{ кг} \cdot \text{м}^2.$$

Оцінимо тепер критичну температуру збудження обертових ступенів вільності одноатомної молекули. У цьому випадку скористаємося формулою (68.14)

$$T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})} \approx \frac{(10^{-34})^2}{10^{-50} \cdot 10^{-23}} \approx \frac{10^{-68}}{10^{-73}} \approx 10^5 \text{ К.}$$

Така ступінь вільності не збуджується за реальних температур практично. Тобто виконується умова:

$$T \ll T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}.$$

Це означає, що обертальні ступені вільності одноатомної молекули внеску до теплоємності не дають. Цим пояснюється тим, що точкова модель одноатомної молекули з трьома поступальними ступенями вільності в класичній статистиці добре узгоджувалися з експериментальними результатами.

2. Двохатомні молекули.

Виберемо модель двохатомної молекули у вигляді двох куль, що знаходяться на певній відстані одна від одної. В такій молекулі є осі обертання двох типів. Вісь типу *A* і вісь типу *B*. Квантово-механічна модель двохатомної молекули приведена на рисунку 56.

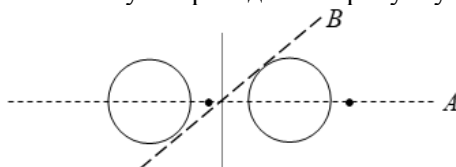


Рис. 56.

Для оцінки критичної температури навколо осі типу *B* треба оцінити момент інерції відносно однієї із цих осей. Формула для моменту інерції двохатомної молекули відносно цих вказаних осей запишеться у вигляді:

$$I_B = 2I_0 + 2m_a(2r_a)^2, \quad (68.17)$$

де I_0 - момент інерції одного з атомів молекули відносно осі, що проходить через центр атома; m_a , r_a - маса атома та його радіус. Тоді для моменту інерції I_B молекули водню запишемо:

$$I_B \approx 2m_a r_a^2. \quad (68.18)$$

Підставляючи числові значення, знаходимо:

$$I_B = 2 \cdot 10^{-27} \cdot 10^{-29} = 2 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2 \approx 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2.$$

Для критичної температури збудження обертальних ступенів вільності у молекулі водню відносно осі обертання навколо осі типу *B* знайдемо (при цьому скористаємося попередніми оцінками моменту інерції атома водню: $I_0 \approx 10^{-50} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$)

$$T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})(B)} \approx \frac{10^{-68}}{10^{-47} \cdot 10^{-23}} \approx 10^2 \text{ К.}$$

Відомо, що для молекули водню точний розрахунок дає значення $T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})(B)} = 85,4 \text{ К.}$ Зокрема, для важчих двоатомних молекул (O_2, N_2) ця температура складає всього лише кілька кельвінів.

Таким чином, за реальних температур у двоатомних молекулах вже будуть збудженими два обертальних ступеня вільності, і за виконання умови $T \gg T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})(B)}$ кожний обертальний ступінь вільності молекули буде давати внесок до теплоємності, що дорівнює $\frac{k}{2}$.

Момент інерції двоатомної молекули відносно осі A легко знайти, використовуючи результати попереднього розрахунку, зокрема формулу:

$$I_A \cong 2I_0, \quad (68.19)$$

тобто $I_A \approx 2 \cdot 10^{-50} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$.

В результаті для критичної температури збудження обертального ступеня вільності відносно обертання навколо осі типу A маємо:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})(A)} \approx \frac{10^{-68}}{2 \cdot 10^{-50} \cdot 10^{-23}} \approx 10^5 \text{ К.}$$

Отже, для осі типу A критична температура дорівнює 10^5 К. Зрозуміло, що цей обертальний ступінь вільності для всіх реальних температур не буде збуджуватись, тому внеску до теплоємності давати не буде.

Таким чином, два обертальних ступені вільності (з трьох) у двоатомній молекулі будуть збуджені для всіх реальних температур. Цим пояснюється той факт, що гантелеподібна модель двоатомної молекули з п'ятьма ступенями вільності (три поступальних та два обертальних ступеня вільності) давала в класичній статистиці добре узгодження з експериментальними результатами.

Висновок. Для переважної більшості газів така ступінь вільності вже буде включена за температур порядку кімнатних. Якщо температури перевищують 10^2 К, то вклад цих двох обертальних ступенів вільності типу B у теплоємність можна розрахувати класичними методами. Так що ці дві обертальні ступені вільності

кожний з яких буде давати внесок у теплоємність, що дорівнює $\frac{k}{2}$ в розрахунку на одну молекулу.

Коливні ступені вільності.

Як приклад, серед коливальних ступенів вільності розглянемо одномірний лінійний осцилятор, для якого енергія у квантовій механіці записується у вигляді:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (68.20)$$

де n - квантове число осцилятора ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Оцінимо критичну температуру для коливних ступенів вільності. Вираз для знаходження критичної температури збудження коливних ступенів вільності $T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}$ має вигляд:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = \frac{\hbar\omega}{k}. \quad (68.21)$$

Враховавши, що власна частота коливань атомів у молекулах ω як це відомо з експериментів $\omega \sim 10^{14} \text{с}^{-1}$, то для критичної температури збудження коливних ступенів вільності $T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}$ отримаємо:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = \frac{10^{-34} \cdot 10^{14}}{10^{-23}} \approx 10^3 \text{ K}.$$

Таблиця 3

Для молекули

НСІ	$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = 4200 \text{ K}$
H ₂	$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = 6100 \text{ K}$
N ₂	$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = 3340 \text{ K}$
O ₂	$T_{\text{кр}}^{(\text{колив})} = 2240 \text{ K}$

Висновок. Отже, коливні ступені вільності у двохатомній молекулі для реальних температур, як правило, не збуджуються, а значить внеску до теплоємності не дають. За достатньо високих температур коливні ступені вільності можуть давати вклад у теплоємність. Тобто лише для температур у кілька тисяч градусів вони починають збуджуватись і давати внесок до теплоємності, який у розрахунку на одну коливну ступінь вільності молекули дорівнює k . Для прикладу, критична температура збудження коливних ступенів вільності (табл. 3) для водню складає 6100 К, для азоту - 3340 К, для

кисню - 2240 К.

Внутрішні (електронні) ступені вільності.

Як приклад, внутрішньої ступені вільності розглянемо електронні ступені вільності. Тобто такі, коли електрон в атомі збуджується і переходить з основного рівня на збуджений. Для числових оцінок розглянемо атом водню. Збудження внутрішніх ступенів вільності відбувається коли електрон у атомі водню переходить на вищий енергетичний рівень. Енергетичні рівні в атомі водню визначаються виразом:

$$E_n = -\frac{\varepsilon^4 m}{32\pi^2 \varepsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_y}{n^2}, \quad (68.22)$$

де n - головне квантове число, R_y - стала Рідберга.

Сталу Рідберга можна знайти за формулою:

$$R_y = \frac{\varepsilon^4 m}{32\pi^2 \varepsilon_0 \hbar^2}. \quad (68.23)$$

Підставляючи значення сталих у формулу (68.23) знайдемо числове значення сталої Рідберга в електрон-вольтах:

$$R_y = 13,6 \text{ eV}.$$

Для такого переходу електрону необхідно надати енергію, яку розраховують за формулою:

$$\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = \frac{3}{4} R_y. \quad (68.24)$$

Відомо, що в атомі водню

$$\Delta E_{21} \approx 10 \text{ eV} \approx 10 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 1,6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}.$$

Оскільки

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}.$$

Формула для знаходження критичної температури збудження внутрішніх (електронних) ступенів вільності:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{ел})} = \frac{\Delta E_{21}}{k}. \quad (68.25)$$

Тоді числове значення критичної температури збудження внутрішніх (електронних) ступенів вільності

$$T_{\text{кр}}^{(\text{ел})} = \frac{1,6 \cdot 10^{-18}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \approx 10^5 \text{ К}.$$

Висновок. Електронні ступені вільності практично ніколи незбуджені і внеску до теплоємності не дають.

Варто зазначити, що в деяких молекулах, наприклад, у молекулі окису азоту NO , є електронний рівень збудження E_2 , що

розташований поблизу основного енергетичного рівня E_1 і достатньо далеко від інших енергетичних рівнів електронного збудження. Тоді для температур $kT \approx E_2 - E_1$ електрон у молекулі збуджується і ця електронна ступінь вільності даватиме помітний внесок до теплоємності (для молекули NO ця температура $T \approx 178$ К). А для $T \rightarrow \infty$ та $T \rightarrow 0$ електронна теплоємність такого типу внеску до теплоємності системи практично давати не буде.

Таким чином, маючи критичні температури для всіх ступенів вільності можна пояснити температурну залежність теплоємності, а також зрозуміти чому число ступенів вільності може бути змінним. Графік залежності теплоємності від температури представлено на рисунку 57.

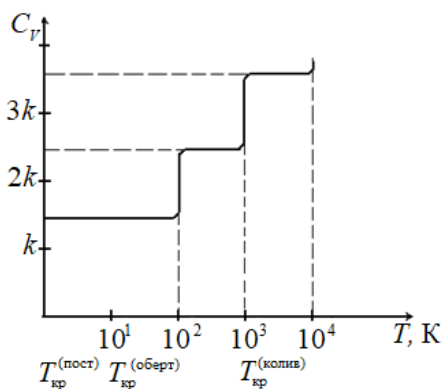


Рис. 57

Висновок. Таким чином, квантова теорія теплоємності повністю пояснює всі експериментальні дані і пояснює труднощі класичної теорії.

§69. Застосування статистичної суми для розрахунку теплоємності за станом однієї частинки

Аналіз даних про теплоємність двохатомних газів показав, що класична статистика приводить до неправильних результатів, - відповідно, для розв'язання поставленої задачі необхідно скористатися формулами з квантової статистики. Як за звичай, розрахунок починається з обрахунку статистичної суми

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} W_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}, \quad (69.1)$$

де верхня межа для енергії взята такою, що дорівнює ∞ .

Енергію ідеального газу можна представити як суму енергій окремих частинок, так як між ними немає взаємодії. Всі можливі стани газової системи можна отримати, перебираючи різні стани окремих молекул. У цьому випадку статистичну суму (69.1) можна представити у вигляді добутку статистичних сум, що відносяться до окремих частинок. Це можна показати на прикладі системи із двох молекул. Після математичних перетворень, приходимо до висновку, що обрахунок суми за станом для всієї системи в цілому зводиться до розрахунку суми за станом однієї молекули (Z_0).

Так як, для квантового ідеального газу статистичну суму Z_0 за станом однієї частинки можна подати у вигляді добутку статистичних сум, що описують різні ступені вільності, то можна записати:

$$Z_0 = Z_{\text{пост}} Z_{\text{оберт}} Z_{\text{колив}}. \quad (69.2)$$

Внутрішня енергія буде обраховуватися через статистичну суму за формулою:

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z. \quad (69.3)$$

Теплоємність газу визначається за формулою

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (69.4)$$

Рівні енергії поступального руху квазінеперервні. Тому статистичну суму $Z_{\text{пост}}$ замінюють інтегралом

$$Z_{\text{пост}} = \int_0^{\infty} e^{-\frac{E_n}{T}} d\Omega(E), \quad (69.5)$$

де $d\Omega(E)$ - число квантових станів, що приходяться на інтервал енергії dE .

Враховуючи формулу

$$I = V(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}, \quad (69.6)$$

отримаємо:

$$Z_{\text{пост}} = \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V. \quad (69.7)$$

Адаптувавши вирази (69.3) та (69.4) для внутрішньої енергії та теплоємності поступального руху, отримаємо

$$U_{\text{пост}} = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \frac{1}{N!} (Z_{\text{пост}})^N, \quad (69.8)$$

$$C_{\text{пост}} = \frac{\partial U_{\text{пост}}}{\partial T}. \quad (69.9)$$

Застосовуючи формули (69.7) - (69.9) знаходимо формулу для розрахунку теплоємності поступального руху

$$C_{\text{пост}} = \frac{3}{2} kN, \quad (69.10)$$

що співпадає з класичним результатом. Цього необхідно очікувати, так як ми не враховували дискретність рівнів енергії і деякими іншими особливостями квантових систем.

Для температурної залежності теплоємності, що пов'язана з обертальними ступенями вільності, запишемо статистичну суму для обертальних ступенів вільності двохатомної молекули, врахувавши, що даному значенні енергії моменту імпульсу може бути $2l + 1$ квантових станів з різною орієнтацією моменту імпульсу:

$$Z_{\text{оберт}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{-\frac{E_l}{\theta}}, \quad (69.11)$$

де E_l - енергія ротатора.

Енергія ротатора приймає ряд дискретних значень:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l + 1), \quad (69.12)$$

де l - орбітальне квантове число ($l = 0, 1, 2, \dots$); I - момент інерції відносно центра мас системи.

З врахуванням виразу (69.12) формула (69.11) прийме вигляд:

$$Z_{\text{оберт}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2IkT}}. \quad (69.13)$$

Введемо критичну температуру:

$$T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})} = \frac{\hbar^2}{2Ik}. \quad (69.14)$$

Підставляючи значення виразу (69.14) у вираз (69.13) дістанемо

$$Z_{\text{оберт}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} l(l+1)} \approx 1 + 3e^{-2\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}}. \quad (69.15)$$

Розрахуємо цю суму для двох граничних випадків: високих та низьких температур.

1. Для високих температур, коли $\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} \ll 1$, енергетичний спектр обертального руху можна вважати квазінеперервним, оскільки

віддаль між сусідніми енергетичними рівнями буде набагато меншою kT . Тоді сумування за значеннями l у формулі (69.15) можна замінити на інтегрування за змінною l :

$$Z_{\text{оберт}} \approx \int_0^{\infty} (2l+1) e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} l(l+1)} dl. \quad (69.16)$$

Зробимо заміну змінних: $x = l(l+1)$, $dx = (l+1)dl$.
Отримаємо:

$$Z_{\text{оберт}} = \int_0^{\infty} e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} x} dx = \frac{T}{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}. \quad (69.17)$$

Запишемо вираз для внутрішньої енергії обертального руху

$$U_{\text{оберт}} = NkT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_{\text{оберт}}. \quad (69.18)$$

Тоді для внутрішньої енергії обертального руху, знаходимо:

$$U_{\text{оберт}} = kT^2 \frac{1}{T} = NkT. \quad (69.19)$$

Відповідно для обертальної теплоємності

$$C_{\text{оберт}} = \frac{\partial U_{\text{оберт}}}{\partial T}. \quad (69.20)$$

Використовуючи формули (69.18) - (69.20) знайдемо теплоємність

$$C_{\text{оберт}} = Nk. \quad (69.21)$$

Теплоємність обертального руху, що розрахована на одну частинку

$$C_{\text{оберт}} = k, \quad (69.22)$$

що і відповідає класичному внеску до теплоємності двох збуджених обертальних ступенів вільності.

2. Для низьких температур, коли $\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} \gg 1$, у сумі (69.15) можна обмежитись лише першими двома доданками і відкинути усі інші у зв'язку з їх малістю:

$$Z_{\text{оберт}} \approx 1 + 3e^{-2\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}}. \quad (69.23)$$

Тоді

$$\ln Z_{\text{оберт}} = \ln \left(1 + 3e^{-2\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}} \right). \quad (69.24)$$

Для внутрішньої енергії обертального руху, що розрахована на

одну частинку відповідно до формул (69.18) та (69.24), маємо:

$$U_{\text{оберт}} = kT^2 \frac{1}{1 + 3e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}}} \cdot 3e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}} \cdot -\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T^2} \approx$$

$$\approx 3kT_{\text{кр}}^{(\text{оберт})} e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}}. \quad (69.25)$$

Отже, для низьких температур внесок обертельних ступенів вільності до теплоємності визначається виразом

$$C_{\text{оберт}} = 3k \left(\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T}}. \quad (69.26)$$

Видно, що для $T \rightarrow 0$, внесок обертельних ступенів вільності до теплоємності зменшується до нуля за експоненціальним законом. Для проміжних же значень температур статистичну суму $Z_{\text{оберт}}$ можна розрахувати лише числовими методами.

Зауваження: викладена тут теорія обертельної теплоємності може бути застосована лише до двохатомних молекул з різними атомними ядрами.

Для дослідження температурної залежності теплоємності, що пов'язана з внеском коливних ступенів вільності, запишемо статистичну суму для коливної ступені вільності двохатомної молекули, врахувавши, що з даним означенням енергії є тільки один квантовий стан:

$$Z_{\text{колив}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}{\theta}} = e^{-\frac{\hbar\omega}{2\theta}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{\theta}}. \quad (69.27)$$

Сума у виразі (69.27) є нескінченно спадною геометричною прогресією:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{\theta}} = 1 + e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} + e^{-\frac{2\hbar\omega}{\theta}} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}}. \quad (69.28)$$

Тоді для статистичної суми (69.28) маємо:

$$Z_{\text{колив}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2\theta}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}}, \quad (69.29)$$

$$\ln Z_{\text{колив}} = -\frac{\hbar\omega}{2\theta} - \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}} \right). \quad (69.30)$$

Загальний вираз для розрахунку величини внутрішньої енергії коливального руху має вигляд:

$$U_{\text{колив}} = NkT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_{\text{колив}}. \quad (69.31)$$

Тоді для внутрішньої енергії коливного руху, що розрахована на одну частинку, знаходимо:

$$U_{\text{колив}} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1} \right). \quad (69.32)$$

Формула для знаходження теплоємності коливального руху має вигляд:

$$C_{\text{колив}} = \frac{\partial U_{\text{колив}}}{\partial T}. \quad (69.33)$$

Для внеску коливної ступені вільності у теплоємність, відповідно, маємо:

$$C_{\text{колив}} = k \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{T}} - 1 \right)^2} = k \left(\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}}{T}}}{\left(e^{\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}}{T}} - 1 \right)^2}. \quad (69.34)$$

1. Для високих температур, коли $x = \frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} \ll 1$, то e^x можна розкласти в ряд. В результаті отримаємо:

$$C_{\text{колив}} = kx^2 \frac{1 + x + \dots}{(1 + x + \dots - 1)^2} = k. \quad (69.35)$$

Бачимо, що у виразі (69.35) отримали результат, який співпадає з класичним внеском одного коливного ступеня вільності у теплоємність.

2. Для низьких температур, коли $x = \frac{T_{\text{кр}}^{(\text{оберт})}}{T} \gg 1$, то одиницею в знаменнику можна знехтувати. Тоді матимемо:

$$C_{\text{колив}} = k \left(\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}}{T}}. \quad (69.36)$$

Видно, що для $T \rightarrow 0$ внесок коливних ступенів вільності у теплоємність експоненціально зменшується, як і у випадку обертових ступенів вільності. Також звернемо увагу, що $C_{\text{колив}} = 0$ для $T = 0$.

Для всіх молекул значення $T_{\text{кр}}^{(\text{колив})}$ порядку декількох тисяч

градусів. Тоді за кімнатних температур і нижче коливальна теплоємність дуже мала.

Зазначимо, що теоретично розрахована теплоємність $C_{\text{колив}}$, яка зумовлена коливаннями молекул, добре узгоджується з експериментальними даними в усьому температурному інтервалі.

§70. Обговорення результатів розрахунку теплоємності газів

При низьких температурах у одноатомному газі збуджені три поступальні ступені вільності, які дають внесок до теплоємності, що дорівнює $\frac{k}{2}$, у розрахунку на один поступальний ступінь вільності молекули. Обертальні ступені вільності можуть збуджуватись, починаючи з температур $T \sim 10^5$ К. Таким чином, практично для всіх реальних температур молекули одноатомного газу будуть поводити себе як матеріальні точки з трьома поступальними ступенями вільності і внеском до теплоємності, що дорівнює $\frac{3}{2}k$, у розрахунку на одну молекулу.

Маючи значення критичних температур збудження різних ступенів вільності, можна тепер передбачити характер залежності теплоємності двохатомних газів від температури $C_V(T)$. Графік температурної залежності теплоємності C_V двохатомного ідеального газу у відповідності з квантовою теорією теплоємності представлений на рисунку 57.

За низьких температур у двохатомному газі збуджені три поступальні ступені вільності, які дають внесок до теплоємності, що дорівнює $\frac{k}{2}$, з розрахунку на один поступальний ступінь вільності молекули.

Для температури $T \sim 10^2$ К збуджуються два обертальних ступеня вільності кожен з яких даватиме внесок до теплоємності, що дорівнює $\frac{k}{2}$, у розрахунку на один обертальний ступінь вільності молекули.

За температури $T \sim 10^3$ К збуджується коливний ступінь вільності, який дає внесок до теплоємності що дорівнює k , у розрахунку на одну молекулу.

Під час подальшого підвищення температури почнуть збуджуватись і інші ступені вільності - електронні, ще один обертальний ступінь вільності, тощо - у відповідності з їх

критичними температурами. Таким чином, квантова теорія теплоємності газів усунула всі недоліки класичної теорії і правильно пояснила експериментальні результати.

Отже, результати застосування квантової статистики до двохатомних газів знаходиться у повній відповідності з експериментальними даними. За кімнатних температур основний внесок у теплоємність газу дає поступальний і обертальний рухи молекули. Під час зниження температури обертальна теплоємність помітно зменшується. Разом з нею зменшується і загальна теплоємність газу. Для низьких температур усі внутрішні ступені вільності «вимерзають». Двохатомний газ має таку ж теплоємність, як одноатомний з тією ж масою молекул. Підвищення температури понад значення ~ 300 K повинно привести до росту теплоємності за рахунок коливальних ступенів вільності. За ще більших температур для легких молекул на збільшення теплоємності може позначитися коливально-обертальна взаємодія і відхилення коливань від гармонічного закону, які тут не враховуються.

За дуже низьких температур теплоємність, що пов'язана з поступальним рухом, повинна спадати. В межах для $T \rightarrow 0$ $C_{\text{пост}} = 0$. Поступальна теплоємність залишається весь час сталою. Щоб отримати правильний результат, необхідно більш послідовно і строго враховувати квантові особливості поведінки частинок: дискретність квантових станів, тотожність частинок, для ферміонів - ще й дію принципу Паулі.

Зауваження: нами було зроблено припущення про те, що можна знехтувати впливом одних ступенів вільності на інші. Доречно зауважити, що за зростання швидкості обертання молекули відцентрові сили змінюють середню відстань між атомами у двохатомній молекулі, що в свою чергу призводить до зміни моменту інерції та частоти коливань. З іншого боку, під час збільшення амплітуди коливань до значень, порівняних із міжатомними відстанями, момент інерції молекули починає залежати від фази коливань. Ось так обертальні та коливні ступені вільності можуть впливати одна на одну.

Якщо ж обмежитись випадком не дуже високих температур, коли середні швидкості обертання і амплітуди коливань не дуже великі, що дає можливість знехтувати розглянутими тут ефектами впливу одних ступенів вільності на інші, то обертальні та коливні ступені вільності у двохатомній молекулі наближено можна вважати

незалежними. Саме в цьому наближенні можна вважати незалежними, взагалі, всі три розглянуті ступені вільності. Тоді енергія молекули буде адитивною стосовно всіх цих ступенів вільності. Це дає можливість здійснювати сумування за квантовими числами поступального, обертального та коливного рухів *незалежно* один від одного. Тоді квантова статистична сума двохатомної молекули Z_0 може бути записана у вигляді добутку статистичних сум поступальних, обертальних та коливних рухів. Тоді і вільна енергія, яка пропорційна $\ln Z_0$, розпадеться на суму вільних енергій для кожного типу руху. В результаті внутрішня енергія, ентропія і теплоємність газу будуть складатися з доданків, що відповідають цим трьом ступеням вільності.

Лекція 21. РЕАЛЬНИЙ ГАЗ

§71. Реальний газ. Статистичний інтеграл для реальних газів в наближенні парних зіткнень.

§72. Наближені вирази для термодинамічних функцій реального газу.

§73. Рівняння Ван дер Ваальса.

[1. §6.11; 2. §6.3; 5. §6.3; 6. §56, §57; 7. §56, §57; 8. §IV.8, §IV.9]

§71. Реальний газ. Статистичний інтеграл для реальних газів в наближенні парних зіткнень

Рівняння стану ідеального газу може застосовуватися на практиці тільки для певних невеликих тисків і концентрацій газу. Якщо ця умова не виконується, то виникає необхідність врахувати взаємодію між молекулами в газі та розміри молекул. Такий газ, в якому враховано розміри молекул та взаємодію між ними ми будемо називати *реальним*.

Знайдемо рівняння стану такого реального газу в наближенні парних зіткнень, коли нехтують потрійними, четвертими і так далі зіткненнями. Для отримання рівняння реального газу будемо користуватися такою схемою:

- необхідно спочатку записати для нього статистичний інтеграл Z ;

- обчислити вільну енергію F такого газу:

$$F = -\theta \ln Z;$$

- за допомогою співвідношення $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$ отримати шукане рівняння стану реального газу.

Таким чином, для того щоб знайти рівняння стану реального газу необхідно знати статистичний інтеграл реального газу. Для спрощення розрахунків розглянемо одноатомний ідеальний газ і запишемо функцію Гамільтона у вигляді:

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{P_{ix}^2 + P_{iy}^2 + P_{iz}^2}{2m} + U(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (71.1)$$

де $\frac{P_{ix}^2 + P_{iy}^2 + P_{iz}^2}{2m}$ - доданок, що описує кінетичну енергію молекул газу; $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ - величина потенціальної енергії взаємодії молекул газу між собою і для одноатомного газу залежить лише від взаємодії віддалей між молекулами, тобто $r_{ik} = |\vec{r}_i - \vec{r}_k|$.

Зауваження: припущення справедливе лише для одноатомного газу, оскільки в інших випадках взаємодія між молекулами, взагалі кажучи, залежить і від взаємної орієнтації молекул.

Запишемо статистичний інтеграл для такого газу:

$$Z = \frac{1}{N! h^s} \int e^{-\frac{H(q, p)}{\theta}} dq dp = \frac{1}{N! h^s} \int e^{-\sum_{i=1}^N \frac{P_{ik}^2 + P_{iy}^2 + P_{iz}^2}{2m\theta}} dp \int e^{-\frac{U}{\theta}} dq, \quad (71.2)$$

де $U(q)$ - потенціальна енергія взаємодії; $\int_V dq = V^N$ (V^N - об'єм газу). Домножимо вираз (71.2) на $\int_V dq$ і розділимо на V^N тоді статистичний інтеграл запишемо в такому вигляді:

$$Z = \frac{1}{N! h^s} \int e^{-\sum_{i=1}^N \frac{P_{ik}^2 + P_{iy}^2 + P_{iz}^2}{2m\theta}} dq dp \cdot \frac{1}{V^N} \int e^{-\frac{U}{\theta}} dq. \quad (71.3)$$

Оскільки в цьому виразі є статистичний інтеграл для ідеального газу

$$Z_{\text{ід}} = \frac{1}{N! h^s} \int e^{-\sum_{i=1}^N \frac{P_{ik}^2 + P_{iy}^2 + P_{iz}^2}{2m\theta}} dq dp, \quad (71.4)$$

то ввівши позначення

$$Z_1 = \frac{1}{V^N} \int e^{-\frac{U}{\theta}} dq = \frac{1}{V^N} \int e^{-\frac{U}{\theta}} d^3r_1 \cdot d^3r_2 \cdot \dots \cdot d^3r_N, \quad (71.5)$$

де $d^3r_i = d^3x_i \cdot d^3y_i \cdot d^3z_i$.

Враховавши всі позначення, статистичний інтеграл для реального газу зручно подати у вигляді:

$$Z = Z_{\text{ід}} \cdot Z_1. \quad (71.6)$$

Зрозуміло, що величина Z_1 описує відхилення газу від ідеальності, і коли взаємодія між молекулами газу відсутня ($U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = U = 0$), то тоді $Z_1 = 1$.

Подамо тепер Z_1 у вигляді, зручному для подальшої роботи, а саме, додамо і віднімемо від підінтегральної функції одиницю:

$$Z_1 = \frac{1}{V^N} \int \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1 \right) dq + \frac{1}{V^N} \int dq = \frac{1}{V^N} \int \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1 \right) dq + 1, \quad (71.7)$$

Зручність такого запису в тому, що відхилення газу від ідеальності повністю описується інтегралом, який входить у Z_1 .

Якщо концентрація газу мала, тобто, *газ слабо неідеальний*, то можна вважати, що під час взаємодії молекул в газі одночасно відбуваються зіткнення тільки двох молекул, нехтуючи у цьому випадку зіткненнями більшого числа молекул: трьох, чотирьох тощо. Таке наближення називається *наближенням парної взаємодії* або *наближенням парних зіткнень*.

Зрозуміло, що у цьому наближенні внесок до поправки Z_1 дають зіткнення між усіма можливими парами молекул в газі. Тобто врахуємо тепер в газі тільки парні зіткнення, таким способом ми враховуємо взаємодію між молекулами в газі вважаючи, що кожна молекула взаємодіє, тільки з однією молекулою, яка найближча до неї. Інтеграл (71.7) оцінимо таким способом: запишемо його у вигляді інтегралу, що описує взаємодію тільки однієї пари молекул і помножимо на число всіх можливих пар в такому газі. Врахувавши, що в системі з N молекул, цю довільну пару молекул можна вибрати $\frac{1}{2}N(N-1)$ способами.

Отже,

$$Z_1 = \frac{N(N-1)}{2V^N} \int \left(e^{-\frac{U}{\theta}} - 1 \right) dq + 1. \quad (71.8)$$

Оскільки у формулі (70.8) підінтегральна функція залежить лише від координат двох частинок q_i та q_k , то тепер у даному виразі можна проінтегрувати по координатах всіх частинок крім тих двох ($N-2$), які ми вибрали

$$\int dq' = V^{N-2}. \quad (71.9)$$

В процесі інтегрування отримаємо V^{N-2} та враховуючи, що для $N \gg 1$ $N(N-1) \approx N^2$, тоді Z_1 набуває такого вигляду:

$$Z_1 = \frac{N^2 V^{N-2}}{2V^N} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) dq_i dq_k + 1 =$$

$$= \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) dq_i dq_k + 1, \quad (71.10)$$

де $dq_i dq_k = d^3 r_i d^3 r_k$.

Тому вираз (70.10) можна записати ще й так:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{N^2 V^{N-2}}{2V^N} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3 r_i d^3 r_k + 1 = \\ &= \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3 r_i d^3 r_k + 1, \end{aligned} \quad (71.11)$$

Таким чином, статичний інтеграл для реального газу ми отримали у вигляді:

$$Z_{\text{реал}} = Z_{\text{ід}} \cdot Z_1, \quad (71.12)$$

де Z_1 - задається формулами (71.10), (71.11).

Виходячи із виразів (71.10), (71.11) і (71.12) можна в принципі отримати рівняння стану реального газу.

§72. Наближені вирази для термодинамічних функцій реального газу

Обчислимо вільну енергію реального газу парних зіткнень:

$$F_{\text{реал}} = -\theta \ln Z_{\text{реал}} = -\theta \ln Z_{\text{ід}} Z_1 = -\theta \ln Z_{\text{ід}} - \theta \ln Z_1 = F_{\text{ід}} - \theta \ln Z_1, \quad (72.1)$$

де $F_{\text{ід}} = -\theta \ln Z_{\text{ід}}$ - вільна енергія ідеального газу; Z_1 - величина, що визначається виразами (71.10) або (71.11):

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) dq_i dq_k + 1 = \\ &= \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3 r_i d^3 r_k + 1. \end{aligned} \quad (72.2)$$

Інтеграл (72.2) описує взаємодію газів в цілому, тому для обчислення $\ln Z_1$ будемо вважати цю взаємодію малою (що можливо для достатньо малих концентрацій) та розкладемо підлогарифмічний вираз в ряд користуючись співвідношенням:

$$\ln(1+x)|_{x \ll 1} \approx 1. \quad (72.3)$$

В результаті отримаємо:

$$\begin{aligned} \ln Z_1 &= \ln \left(\frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3 r_i d^3 r_k + 1 \right) = \\ &\approx \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3 r_i d^3 r_k. \end{aligned} \quad (72.4)$$

Тоді вираз для вільної енергії реального газу має вигляд:

$$\begin{aligned}
F_{\text{реал}} &= F_{\text{ід}} - \theta \frac{N^2}{2V^2} \iint \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3r_i d^3r_k = \\
&= F_{\text{ід}} - kT \frac{N^2}{2V^2} \iint \left(e^{-\frac{U_{ik}}{\theta}} - 1 \right) d^3r_i d^3r_k.
\end{aligned} \quad (72.5)$$

Нагадаємо, що потенціальна енергія взаємодії молекул одноатомного газу між собою залежить лише від взаємодії віддалей $r_{ik} = |\vec{r}_i - \vec{r}_k|$ між молекулами, тобто

$$U_{ik} = U(|\vec{r}_i - \vec{r}_k|). \quad (72.6)$$

Тому в інтегралі (72.5) зручно перейти до відносних координат

$$\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_k \quad (72.7)$$

та до координат центра мас так як це завжди робиться в задачі двох тіл:

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_k}{2}. \quad (72.8)$$

Після підстановки виразів (72.6), (72.7), (72.8) в рівність (72.5) по координатах центра мас R можна проінтегрувати

$$F_{\text{реал}} = F_{\text{ід}} - kT \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}(r)}{\theta}} - 1 \right) d^3r \int d^3R. \quad (72.9)$$

Оскільки підінтегральна функція залежить тільки від r , а від R не залежить, тому за цією змінною можна проінтегрувати:

$$\int_V d^3R = V. \quad (72.10)$$

В результаті, для вільної енергії реального газу маємо:

$$\begin{aligned}
F_{\text{реал}} &= F_{\text{ід}} - kT \frac{N^2}{2V^2} \int \left(e^{-\frac{U_{ik}(r)}{\theta}} - 1 \right) d^3r = \\
&= F_{\text{ід}} + kT \frac{N^2}{V^2} \frac{1}{2} \int \left(1 - e^{-\frac{U_{ik}(r)}{\theta}} \right) d^3r = \\
&= F_{\text{ід}} + \frac{kTN^2}{V} B(T),
\end{aligned} \quad (72.11)$$

де використано позначення:

$$B(T) = \frac{1}{2} \int \left(1 - e^{-\frac{U_{ik}(r)}{\theta}} \right) d^3r. \quad (72.12)$$

Щоб отримати рівняння реального газу Ван дер Ваальса у явному вигляді розглянемо детальніше величину $B(T)$. Для того, щоб все сказане вище мало зміст, необхідно, щоб інтеграл $B(T)$ був збіжним. Тобто все сказане має зміст, зрозуміло, за умови збіжності інтеграла $B(T)$. Для виконання цього необхідно, щоб сили взаємодії

між молекулами газу досить швидко зменшувались (за модулем) із зростанням віддалі, а саме на великих віддальах $U_{ik}(r)$ тіло повинно падати швидше ніж $\frac{1}{r^{3+\varepsilon}}$, тобто $U_{12}(r) \sim \frac{1}{r^{3+\varepsilon}}$.

Для одноатомних молекул потенціальна енергія взаємодії молекул $U_{ik}(r) = U(r)$. Графік залежності потенціальної енергії взаємодії одноатомних молекул $U(r)$ від віддалі r між ними має такий вигляд, як показано на рисунку 58.

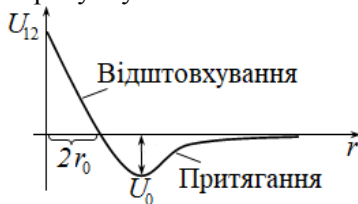


Рис. 58

Пояснимо цю криву взаємодії. На великих віддальах між молекулами існує слабе притягання. Саме притягання переважає над силами відштовхування. В точці мінімальної потенціальної енергії взаємодії сили притягання і відштовхування зрівноважуються. За подальшого зростання відстані між молекулами сили притягання між молекулами (які ще називають вандервальськими) досить швидко зменшуються (приблизно за законом $U(r) \sim r^{-6}$) асимптотично наближаючись до нуля. За подальшого зменшення віддалі швидко наростають сили відштовхування. Коли $r_0 < 2r_0$ (r_0 - радіус атома), то починається взаємне проникнення атомів. Зазначимо, що величина U_0 досить мала у порівнянні з kT (в даних умовах для температур, що відповідають не дуже великим тискам, а значить, і слабким відхиленням газу від ідеальності).

Зауваження: взагалі кажучи, точний вигляд функції $U(r)$ невідомий. Тому для інтерпретації експериментальних результатів користуються різними напівемпіричними виразами для $U(r)$. Зокрема, часто використовують потенціал Ленарда-Джонса:

$$U(r) = 4U_0 \left[\left(\frac{R_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{R_0}{r} \right)^6 \right] \quad (72.13)$$

або потенціал Морзе:

$$U(r) = U_0 [1 - e^{-a(r-d)}]^2, \quad (72.14)$$

де R_0 відповідає значенню потенціальної енергії $U(R_0) = 0$; U_0 - мінімальне значення потенціальної енергії взаємодії (глибина

потенціальної ями).

Як правило, значення величини R_0 , a , d , U_0 підбирають так, щоб досягти найкращого співпадання з експериментальними даними.

Враховуючи властивості функції $U(r) = U_{ik}(r)$, можна зробити наближену оцінку інтеграла $B(T)$. Спочатку перейдемо у цьому інтегралі до сферичної системи координат і проінтегруємо по кутах:

$$B(T) = \frac{1}{2} 4\pi \int_0^\infty \left(1 - e^{-\frac{U_{ik}(r)}{\theta}}\right) r^2 dr = 2\pi \int_0^\infty \left(1 - e^{-\frac{U(r)}{\theta}}\right) r^2 dr. \quad (72.15)$$

З'ясувавши, що поведінка функції $U(r)$ для $r < r_0$ різко відрізняється від поведінки на інших ділянках (тут вона додатна і $U(r) \rightarrow \infty$ для $r \rightarrow 0$), інтеграл $B(T)$ можна подати у вигляді суми двох інтегралів B_1 та B_2 :

$$B(T) = 2\pi \int_0^{2r_0} \left(1 - e^{-\frac{U(r)}{kT}}\right) r^2 dr + \\ + 2\pi \int_{2r_0}^\infty \left(1 - e^{-\frac{U(r)}{kT}}\right) r^2 dr = B_1 + B_2, \quad (72.16)$$

де

$$B_1 = 2\pi \int_0^{2r_0} \left(1 - e^{-\frac{U(r)}{kT}}\right) r^2 dr, \quad (72.17)$$

$$B_2 = 2\pi \int_{2r_0}^\infty \left(1 - e^{-\frac{U(r)}{kT}}\right) r^2 dr. \quad (72.18)$$

В інтегралі B_1 функція $U(r)$ набуває великих додатних значень (в розумінні, що $\frac{U(r)}{kT} \gg 1$). Тоді $e^{-\frac{U(r)}{kT}} \ll 1$ і цим доданком у підінтегральній функції можна знехтувати. В результаті для B_1 отримуємо:

$$B_1 = 2\pi \int_0^{2r_0} r^2 dr = 2\pi \frac{r^3}{3} \Big|_0^{2r_0} = 4 \cdot \frac{4}{3} \pi r_0^3 = 4V_0 \equiv b, \quad (72.19)$$

де $V_0 = \frac{4}{3} \pi r_0^3$ - об'єм атома.

В інтегралі B_2 функція $U(r)$ навпаки, від'ємна, причому $\frac{|U(r)|}{kT} \ll 1$. Тому експоненту можна розкласти в ряд, обмежившись

лінійним членом розкладу:

$$e^{-\frac{U(r)}{kT}} \approx 1 - \frac{U(r)}{kT} = 1 + \frac{|U(r)|}{kT}. \quad (72.20)$$

В результаті для B_2 отримаємо:

$$\begin{aligned} B_2 &= 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} \left(1 - 1 - \frac{|U(r)|}{kT} \right) r^2 dr = \\ &= -\frac{1}{kT} 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} |U(r)| r^2 dr = -\frac{a}{kT}, \end{aligned} \quad (72.21)$$

де $a = 2\pi \int_{2r_0}^{\infty} |U(r)| r^2 dr$ – величина, що описує взаємне

притягання молекул газу.

Таким чином, інтеграл $B(T)$ можна подати у вигляді:

$$B(T) = b - \frac{a}{kT}, \quad (72.22)$$

де b - величина, що враховує розміри молекул газу; a - величина, що виражає наявність сил притягання між молекулами реального газу.

Отже, з урахуванням означення інтегралу $B(T)$, вільну енергію реального газу у виразі (72.11) можна записати так:

$$F_{\text{реал}} = F_{\text{ід}} + \frac{kTN^2}{V} \left(b - \frac{a}{kT} \right) \quad (72.23)$$

Зауваження: маючи вираз для вільної енергії реального газу, легко знайти й інші термодинамічні функції реального газу, наприклад, термодинамічний потенціал Гіббса:

$$\Phi_{\text{реал}} = \Phi_{\text{ід}} + \frac{kTN^2}{V} \left(b - \frac{a}{kT} \right) = \Phi_{\text{ід}} + NP \left(b - \frac{a}{kT} \right). \quad (72.24)$$

Тепер в принципі виходячи з виразу (72.23) можна знайти рівняння стану ідеального газу

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V}, \quad (72.25)$$

$$P_{\text{ід}} = -\frac{\partial F_{\text{ід}}}{\partial V} = \frac{NkT}{V}. \quad (72.26)$$

Надамо вразу (72.23) вигляду формули (72.11) та продиференціюємо його по V , отримаємо

$$P = -\frac{\partial F_{\text{ід}}}{\partial V} + \frac{kTN^2}{V} B(T) = \frac{NkT}{V} + \frac{kTN^2}{V} B(T) =$$

$$= \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{N}{V}(T) \right). \quad (72.27)$$

Вираз (72.27) вже містить в собі рівняння стану реального газу. Причому з виразу (72.27) видно, що коли знехтувати величиною $B(T)$, яка описує взаємодію між молекулами та містить інформацію про розміри молекули, то тоді з виразу (72.27) слідує рівняння стану ідеального газу Клапейрона-Менделєєва

$$P_{\text{ид}} = \frac{NkT}{V}. \quad (72.28)$$

Знайдемо тепер вільну енергію реального газу користуючись співвідношенням (72.23)

$$\begin{aligned} F_{\text{реал}} &= F_{\text{ид}} + \frac{kTN^2}{V} \left(b - \frac{a}{kT} \right) = F_{\text{ид}} + \frac{kN^2}{V} \left(bT - \frac{a}{k} \right) = \\ &= -NkT \left(\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{2\pi mkT}{h^2} + 1 \right) + \frac{kN^2}{V} \left(bT - \frac{a}{k} \right). \end{aligned} \quad (72.29)$$

Об'єднаємо два підкреслені члени у виразі (72.29), отримаємо:

$$\begin{aligned} F_{\text{реал}} &= NkT \left(\ln \frac{V}{N} - \frac{Nb}{b} \right) - NkT \left(\frac{3}{2} \ln \frac{2\pi mkT}{h^2} + 1 \right) - \frac{N^2 a}{V} = \\ &= -NkT \left(\ln V - \frac{Nb}{V} \right) - NkT \left(\frac{3}{2} \ln \frac{2\pi mkT}{h^2} + 1 + \ln \frac{1}{N} \right) - \frac{N^2 a}{V}, \end{aligned} \quad (72.30)$$

де b - об'єм молекул.

Скористаємось тим, що

$$\ln(V - Nb) = \ln \left[V \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \right] = \ln V + \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) = \ln V - \frac{Nb}{V}. \quad (72.31)$$

Тепер підставимо вираз (72.31) у формулу (72.30)

$$\begin{aligned} F_{\text{реал}} &= -NkT \ln \left[V \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \right] - NkT \left[\frac{3}{2} \ln \frac{2\pi mkT}{h^2} + 1 + \ln \frac{1}{N} \right] - \frac{N^2 a}{V} = \\ &= -NkT \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) - NkT \left[\ln \frac{V}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{2\pi mkT}{h^2} + 1 \right] - \frac{N^2 a}{V} = \\ &= F_{\text{ид}} - NkT \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V}. \end{aligned} \quad (72.32)$$

Отримаємо вирази для ентропії та внутрішньої енергії реального газу. Користуючись виразом $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, для ентропії реального газу знаходимо:

$$S_{\text{реал}} = S_{\text{ид}} + NkT \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right). \quad (72.33)$$

Тоді з допомогою співвідношення $U = F + TS$ для внутрішньої енергії реального газу маємо:

$$U_{\text{реал}} = U_{\text{ид}} - \frac{aN^2}{V}. \quad (72.34)$$

В цій формулі величина $\frac{aN^2}{V}$ відповідає енергії взаємодії молекул. Оскільки в газі в середньому переважають сили притягання між молекулами, то ця величина є від'ємною.

§73. Рівняння Ван дер Ваальса

Виходячи з виразу для вільної енергії реального газу (72.23), виведемо рівняння стану реального газу - *рівняння Ван дер Ваальса*. Для цього перепишемо вільну енергію у вигляді:

$$F_{\text{реал}} = F_{\text{ид}} + NkT \frac{Nb}{V} - \frac{aN^2}{V} = F_{\text{ид}} - NkT \left(-\frac{Nb}{V} \right) - \frac{aN^2}{V}. \quad (73.1)$$

Величина Nb рівна об'єму всіх молекул газу, який набагато менший об'єму посудини V , тобто $\frac{Nb}{V} \ll 1$. З урахуванням цього співвідношення можна скористатись таким наближенням:

$$\ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) \approx -\frac{Nb}{V}. \quad (73.2)$$

Тоді вільну енергію реального газу можна записати у такому вигляді:

$$F_{\text{реал}} = F_{\text{ид}} - NkT \ln \left(1 - \frac{Nb}{V} \right) - \frac{aN^2}{V}. \quad (73.3)$$

Видно, що для великих значень об'єму V цей вираз переходить у формулу для вільної енергії ідеального газу, а за малих значень V з цього виразу випливає неможливість безмежного стискування газу (для $V < Nb$ аргумент логарифма стає від'ємним).

Для того, щоб безпосередньо отримати рівняння Ван дер Ваальса, обчислимо тиск реального газу за формулою:

$$P = -\frac{\partial F_{\text{реал}}}{\partial V} = -\frac{\partial F_{\text{ид}}}{\partial V} + NkT \frac{1}{1 - \frac{Nb}{V}} \cdot \frac{Nb}{V^2} - \frac{N^2 a}{V^2}. \quad (73.4)$$

Врахувавши вираз (72.26) для ідеального газу, то формулу (73.4) для тиску реального газу запишемо у вигляді:

$$P = \frac{NkT}{V} + \frac{N^2 kTb}{V^2 \left(1 - \frac{Nb}{V} \right)} - \frac{N^2 a}{V^2} = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V \left(1 - \frac{Nb}{V} \right)} \right) - \frac{N^2 a}{V^2} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V - \frac{NbV}{V}} \right) - \frac{N^2a}{V^2} = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{Nb}{V - Nb} \right) - \frac{N^2a}{V^2} = \\
 &= \frac{NkT}{V} \frac{V}{V - Nb} - \frac{N^2a}{V^2} = \frac{NkT}{V - Nb} - \frac{N^2a}{V^2}.
 \end{aligned} \quad (73.5)$$

Вираз (73.5) перепишеться в такому вигляді:

$$\left(P + \frac{N^2a}{V^2} \right) = \frac{NkT}{V - Nb}. \quad (73.6)$$

Вираз (73.6) запишемо дещо в іншому вигляді:

$$\left(P + \frac{N^2a}{V^2} \right) (V - Nb) = NkT. \quad (73.7)$$

Вираз (73.7) є рівнянням реального газу Ван дер Ваальса.

В курсі загальної фізики має такий вигляд:

$$(P + a)(V - b) = NkT. \quad (73.8)$$

Очевидно, що вирази (73.7) і (73.8) є ідентичними рівняннями.

Проаналізуємо на основі виразу (73.7) властивості реального газу. Тобто з'ясуємо тепер фізичний зміст поправок до тиску та об'єму, що входять у рівняння Ван дер Ваальса.

1. Поправка Nb до об'єму V враховує скінченний об'єм молекул, тобто враховує реальний розмір молекул. Із рівняння Ван дер Ваальса видно, що об'єм допустимий для руху молекул зменшується на величину об'єму самих молекул.

2. Поправка $\frac{N^2a}{V^2}$ до тиску зменшує тиск реального газу у порівнянні з тиском ідеального газу, тобто з рівняння Ван дер Ваальса видно, що тиск в реальному газі по відношенню до ідеального газу менший на величину $\frac{N^2a}{V^2}$.

Дійсно, якщо позначити $P_{\text{ід}} = \frac{NkT}{V}$, то з рівняння Ван дер Ваальса видно, що тиск в реальному газі визначається співвідношенням:

$$P = \frac{NkT}{V - Nb} - \frac{N^2a}{V^2} \approx P_{\text{ід}} - \frac{N^2a}{V^2}.$$

Вказаний ефект (зменшення тиску в реальному газі) можна пояснити з фізичних міркувань. Для цього розглянемо молекулу, що перебуває далеко від стінок в об'ємі газу. В цьому випадку сили притягання цієї молекули з боку всіх інших будуть в середньому рівні нулю (будуть

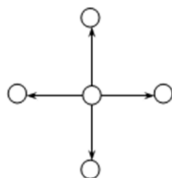


Рис. 59

компенсуватися) (рис. 59).

Якщо розглянути молекулу, що перебуває поблизу стінки рухаючись до неї, то для цієї молекули сили притягання до стінки в напрямку перпендикулярному до неї компенсуватися з боку молекул не будуть (рис. 60). Тобто, така молекула буде відчувати притягання з боку молекул об'єму. Таким чином, об'єм її в стінку буде слабшим ніж у випадку відсутності взаємодії. Отже, тиск в такому реальному газі буде меншим ніж в ідеальному.

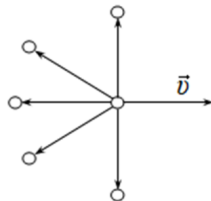


Рис. 60

Поправку $\frac{N^2 a}{V^2}$ називають ще «внутрішнім тиском» в газі, який виникає завдяки взаємному притягання молекул газу. Тиск реального газу на стінки посудини буде меншим, ніж тиск ідеального газу, що займає такий же об'єм за тієї ж температури саме на величину цієї поправки.

3. Якщо розглянути рівняння Ван дер Ваальса як рівняння для знаходження об'єму для значень P і T , то це рівняння буде представляти собою рівняння третьої степені відносно V . В перетвореному вигляді воно таке:

$$V^3 - \left(Nb + \frac{RT}{P}\right)V^2 + \frac{N^2 a}{P}V - \frac{ab}{P}N^3 = 0. \quad (73.9)$$

Таке рівняння третього степеня з дійсними коефіцієнтами може мати один дійсний і два комплексних, або три дійсних розв'язки.

Отже, на PV площині пряма (рис. 61), що паралельна осі V може перетинати ізотеру в трьох точках або в одній.

Зауваження: ізотерна такого типу часто використовуються для аналізу переходу рідини в газоподібний стан. Причому, область лівої частини відповідає рідині, а права - газоподібному, центральна - метастабільним станам. Особливості переходу речовини з одного стану в інший розглянуті нами будуть в наступному параграфі.

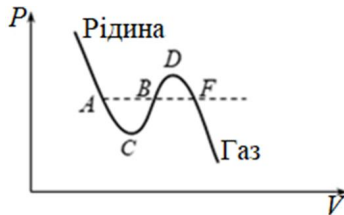


Рис. 61

Рівняння Ван дер Ваальса досить добре описує поведінку розріджених газів для температур набагато вищих за температуру

конденсації газу. Якщо ж використовувати це рівняння для газів, що перебувають в інших умовах (більша густина, нижчі температури), то треба мати на увазі, що тоді поправкам до тиску та об'єму неможна приписати такий самий фізичний зміст. Їх тоді підбирають так, щоб досягти кращого співпадання з дослідними даними. Зрозуміло, що в різних температурних інтервалах і для різних тисків ці поправки будуть різними.

Зазначимо також, що рівняння Ван дер Ваальса не являється єдиним можливим рівнянням стану реального газу. Крім рівняння Ван дер Ваальса, було запропоновано багато й інших напівемпіричних рівнянь. Запишемо найвідоміші з них.

Рівняння Дітерічі:

$$P(V - b) = RTe^{-\frac{a}{RTV}}. \quad (73.10)$$

Рівняння Берто:

$$\left(P + \frac{a}{TV^2}\right)(V - b) = RT. \quad (73.11)$$

Рівняння Клаузіуса:

$$\left(P + \frac{a}{T(V + c)^2}\right)(V - b) = RT. \quad (73.12)$$

За рахунок введення додаткових емпіричних констант з допомогою цих рівнянь вдалося досягти навіть кращого узгодження з експериментальними даними у порівнянні з рівнянням Ван дер Ваальса. Але завдяки своїй простоті та прозорому фізичному змісту поправок, що входять до нього рівняння Ван дер Ваальса є найуживанішим рівнянням для якісного дослідження поведінки реальних газів та процесу переходу до рідкого стану.

Лекція 22. РІВНОВАГА ФАЗ. ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ

§74. Екстремальні властивості термодинамічного потенціалу Гіббса.

§75. Поняття про різні фази речовини.

§76. Умови рівноваги фаз.

§77. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Рівновага систем: тверде тіло-рідина, рідина-газ.

[1. §2.1-§2.4; 2. §8.1-§8.5; 4. §15; 5. §4.6, §4.8; 6. §58-§60; 7. §58, §59; 8. §V.1, §V.2]

§74. Екстремальні властивості термодинамічного потенціалу Гіббса

Покажемо, що термодинамічний потенціал Гіббса має екстремальні властивості, тобто приймає мінімальне значення в стані термодинамічної рівноваги. Як ми знаємо, для нестатичних процесів має місце нерівність:

$$dU \leq TdS - PdV. \quad (74.1)$$

Причому нерівність відповідає нестатичним процесам, рівність квазістатичним. Для термодинамічного потенціалу Гіббса ми мали

$$\Phi = U - TS + PV. \quad (74.2)$$

Підставимо тепер в праву і ліву частину диференціал

$$d(U - TS + PV) \leq TdS - PdV - TdS + SdT + PdV + VdP. \quad (74.3)$$

Після скорочення отримаємо:

$$d\Phi \leq -SdT + VdP. \quad (74.4)$$

В процесі встановлення рівноваги, коли $P = \text{const}$ і $T = \text{const}$, якщо процес нерівноважний

$$d\Phi < 0. \quad (74.5)$$

Тобто в процесі встановлення рівноваги у системі термодинамічний потенціал Гіббса буде зменшуватися. Якщо в результаті цього система прийде в стан термодинамічної рівноваги, то

$$\frac{\hbar\omega}{\Theta} \ll 1. \quad (74.6)$$

В цьому випадку Φ прийме мінімальне значення:

$$\Phi = \Phi_{\min}. \quad (74.7)$$

Таким чином, за перебігу в системі необоротного процесу термодинамічний потенціал Гіббса зменшиться (коли $P = \text{const}$ і $T = \text{const}$), а коли система приходить в стан термодинамічної рівноваги, то термодинамічний потенціал Гіббса набуває мінімального значення.

Отже, рівноважному стану системи відповідає мінімальне значення термодинамічного потенціалу Гіббса.

Зауваження: нерівність (74.4) має зміст тоді і тільки тоді, коли параметри P , V , T , S мають певні значення у нерівноважних станах системи. Відповідно до закону зростання ентропії, що ентропія може мати певне значення і у нерівноважних станах. Що ж стосується параметрів P , V , T , то ми будемо розглядати лише такі нерівноважні стани, в яких ці параметри набувають постійних значень, причому, градієнти температури та тиску в цих станах відсутні. Це означає, що ми матимемо справу з такими термодинамічними системами, стан

яких характеризується не тільки параметрами P , V , T , а і деякими іншими змінними параметрами. Саме ці параметри в процесі встановлення рівноваги і набувають певного рівноважного значення. Як ми покажемо далі, цими параметрами є хімічні потенціали рівних частин (фаз) системи. Але спочатку розглянемо поняття про різні фази речовини.

§75. Поняття про різні фази речовини

Рівноважний стан тіла визначається заданням яких-небудь двох термодинамічних величин, наприклад, об'єму V і внутрішньої енергії U . Але немає ніяких причин стверджувати, що для будь якої заданої пари величин V і U у рівноважному стану тіла буде відповідати його повна однорідність. Може статись так, що за деяких значень об'єму та енергії в тепловій рівновазі тіло не буде однорідним, а буде розпадатись на дві різних (в фізичному розумінні) частини, що дотикаються між собою і перебувають в різних фізичних станах. Такі стани речовини, які можуть існувати одночасно в рівновазі, дотикаючись між собою називаються *різними фазами речовини*. Інакше кажучи, *фазою* ми будемо називати фізично однорідну частину системи, що відрізняється своїми фізичними властивостями від інших частин і виділяється від них чітко вираженою межею. Прикладом двофазних систем можуть бути рідина та її насичена пара, рідина та кристали, дві кристалічні модифікації однієї і тієї ж речовини.

Двофазні системи можуть складатися з рідини та кристалу, з двох кристалічних модифікацій однієї і тієї ж самої речовини, що дотикаються між собою тощо. Можливою є і така двофазна система, що складається з двох рідких фаз, наприклад, система, що складається з гелію - I та гелію - II (He - I - звичайна фаза, He - II - надтекуча фаза). З цих прикладів видно, що поняття *фази* та *агрегатного стану речовини* відрізняються між собою і їх не слід плутати, оскільки агрегатних станів всього три (не рахуючи плазмового стану), а різних фаз може бути значно більше, тому що в твердому стані речовина може мати кілька кристалічних фаз. Наприклад, тверда сірка може бути в ромбічній та моноклінній фазі, лід має не менше шести різних кристалічних фаз, що відрізняються структурою кристалічної ґратки, тощо.

Зауваження: у системі де фази знаходяться в рівновазі незначна зміна зовнішніх умов (це введення або виведення з системи певної

кількості теплоти) приводить до того, що певна частина речовини переходить з однієї фази в іншу. Тому вивчаючи умови рівноваги фаз, ми одночасно розглянемо протікання фазових переходів.

§76. Умови рівноваги фаз

Розглянемо тепер умови рівноваги двох фаз. Перш за все як для двох довільних тіл, що перебувають у стані термодинамічної рівноваги температури в двох фазах повинні бути однаковими:

$$T_1 = T_2. \quad (76.1)$$

По друге, тиски повинні в обох фазах бути рівними:

$$P_1 = P_2, \quad (76.2)$$

так як сили з якими одна фаза діє на другу по поверхні їх дотику повинні бути однаковими.

Покажемо, що для рівноваги двох фаз необхідна умова рівності хімічних потенціалів речовини в обох фазах:

$$\mu_1 = \mu_2. \quad (76.3)$$

Розглянемо термодинамічний потенціал Гіббса двофазної системи

$$\Phi = \Phi(T, P, N_1, N_2). \quad (76.4)$$

Візьмемо диференціал від лівої і правої частини виразу (76.4)

$$d\Phi = -SdT + VdP + \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2. \quad (76.5)$$

Оскільки

$$\mu_1 = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N_1} \right)_{PTN_2}; \quad \mu_2 = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N_2} \right)_{PTN_1}, \quad (76.6)$$

то зміна термодинамічного потенціалу Гіббса, що пов'язана із зміною числа частинок в кожній фазі, в цих умовах може бути записана у вигляді:

$$\begin{aligned} (d\Phi)_{T,P} &= \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N_1} \right)_{PTN_2} \cdot dN_1 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N_2} \right)_{PTN_1} \cdot dN_2 = \\ &= \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2. \end{aligned} \quad (76.7)$$

В процесі встановлення рівноваги за сталих P і T

$$(d\Phi)_{T,P} = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2. \quad (76.8)$$

Відомо, що для встановлення термодинамічної рівноваги

$$(d\Phi)_{T,P} < 0. \quad (76.9)$$

Тобто

$$\mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 < 0. \quad (76.10)$$

Так як

$$N_1 + N_2 = \text{const}, \quad (76.11)$$

то звідси слідує, що

$$dN_1 + dN_2 = 0, \quad (76.12)$$

а

$$dN_1 = -dN_2. \quad (76.13)$$

Після підстановки виразу (76.13) у вираз (76.10) можна записати, що

$$(\mu_1 - \mu_2)dN_1 < 0. \quad (76.14)$$

Якщо хімічні потенціали в фазах $\mu_1 > \mu_2$, то з виразу (76.14) слідує

$$dN_1 < 0. \quad (76.15)$$

Тобто під час встановлення термодинамічної рівноваги, частинки будуть переходити з фази з більшим потенціалом до фази з меншим хімічним потенціалом. І навпаки, якщо $\mu_1 < \mu_2$, то

$$dN_1 > 0. \quad (76.16)$$

В цілому можна сказати, що потік речовини направлений від фази з більшим хімічним потенціалом до фази з меншим хімічним потенціалом. А в стані термодинамічної рівноваги термодинамічний потенціал Гіббса $d\Phi = 0$, тобто хімічні потенціали фаз в умовах рівноваги будуть однаковими

$$\mu_1 = \mu_2. \quad (76.17)$$

Таким чином, для потоку речовини з однієї фази в іншу хімічний потенціал відіграє таку ж роль як температура для потоку тепла або тиск для потоку газу у відповідних процесах випромінювання. Тобто потік тепла направлений від областей з більшою температурою в області речовини з меншою температурою. Потік газу направлений від області з більшим тиском до області з меншим тиском. Ці обидва процеси припиняються, коли вирівнюються температури і тиски.

Аналогічно потік речовини направлений від фази з більшим хімічним потенціалом до фази з меншим хімічним потенціалом і припиняється, коли хімічні потенціали в обох фазах вирівнюються. Якщо хімічні потенціали виражені як функції температури і тиску, то умови їх рівності за однакових температур і тисків в обох фазах можуть бути записані у вигляді:

$$\mu_1(P, T) = \mu_2(P, T). \quad (76.18)$$

З цього рівняння температура і тиск фаз, що знаходяться в рівновазі, можуть бути виражені як функції одна від одної.

Таким чином, дві фази речовини можуть перебувати в рівновазі між собою не для будь яких тисків і температур. Задання однієї з цих величин цілком повністю буде визначати другу.

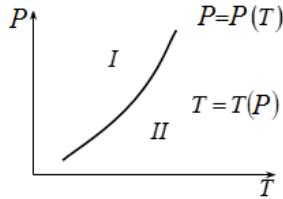


Рис. 62

Якщо відкласти на осях координат P і T (рис. 62), то точки в яких можлива рівновага фаз, будуть лежати на деякій кривій, що називається *кривою рівноваги фаз*. Тоді точки, що лежать по різні сторони кривої будуть відповідати різним станам тіла. Очевидно, що крива рівноваги фаз задається рівнянням, яке безпосередньо слідує з рівняння (76.18).

§77. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Рівновага систем: тверде тіло-рідина, рідина-газ

Покажемо, як не маючи конкретного виразу для хімічного потенціалу системи знайти рівняння кривої фазового переходу. Для цього продиференціюємо рівність

$$\mu_1(P, T) = \mu_2(P, T) \quad (77.1)$$

за температурою і тиском. Врахувавши, що $P = P(T)$, то

$$\frac{\partial \mu_1}{\partial T} + \frac{\partial \mu_1}{\partial p} \frac{dP}{dT} = \frac{\partial \mu_2}{\partial T} + \frac{\partial \mu_2}{\partial p} \frac{dP}{dT}. \quad (77.2)$$

Зміст похідних від хімічного потенціалу за температурою легко з'ясувати, якщо згадати співвідношення:

$$S = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{P,a} \quad V = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_{T,a} \quad (77.3)$$

Оскільки $\mu = \frac{\Phi}{N}$, то з попередніх параграфів відомо, що

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = -\frac{S}{N} = -S_0. \quad (77.4)$$

Вираз (77.4) - це вираз для ентропії розрахованої на одну частинку. Для

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = \frac{V}{N} = V_0. \quad (77.5)$$

Вираз (77.5) - це об'єм, що припадає на одну молекулу.

Підставимо рівняння (77.4) і (77.5) у рівняння (77.2) в результаті отримаємо:

$$-S_{0_1} + V_{0_1} \frac{dP}{dT} = -S_{0_2} + V_{0_2} \frac{dP}{dT} \quad (77.6)$$

або

$$\frac{dP}{dT} = \frac{S_{0_1} - S_{0_2}}{V_{0_1} - V_{0_2}} = \frac{\Delta S_{0_{12}}}{V_{0_1} - V_{0_2}} = \frac{\Delta q_{12}}{T(V_{0_1} - V_{0_2})}, \quad (77.7)$$

$$\Delta q_{12} = \frac{\delta Q_{12}}{N}. \quad (77.8)$$

Перепишемо рівняння (77.7) у такому вигляді:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta q_{12}}{T(V_{0_1} - V_{0_2})} = \frac{\Delta q_{21}}{T(V_{0_2} - V_{0_1})}. \quad (77.9)$$

Рівняння (77.9) називається *рівнянням Клапейрона-Клаузіуса*. В цьому рівнянні Δq_{21} це скрита теплота переходу. Рівняння (77.9) виражає зміну тиску рівноважних фаз за зміни температури або визначає зміну тиску з температурою вздовж кривої рівноваги фаз. Формулу (77.9) можна записати у вигляді:

$$\frac{dT}{dP} = \frac{T(V_{0_1} - V_{0_2})}{\Delta q_{21}}. \quad (77.10)$$

Вираз (77.10) визначає зміну температури переходу між двома фазами за зміни тиску. На основі виразу (77.10) якісно проаналізуємо в яку сторону змінюється температура кипіння за зміни тиску. Тоді перша фаза - рідина, друга - газ. Оскільки $V_{0_2} \gg V_{0_1}$ і під час переходу рідини в газ $\Delta q_{21} > 0$ теплота завжди поглинається, то

$$\frac{dT}{dP} > 0. \quad (77.11)$$

За зростання тиску, коли $dP > 0$, то $dT > 0$, тобто температура кипіння під час зростання тиску завжди зростає і навпаки. Виходячи з виразу (77.10) проаналізуємо як змінюється температура плавлення в залежності від зміни тиску.

Зауваження: для різних речовин ця залежність може бути різною, оскільки співвідношення між молекулярним об'ємом в рідині і твердому тілі - різне.

Розглянемо для прикладу танення льоду: 1 - лід; 2 - рідина

$$V_{0_1} > V_{0_2}; \Delta q_{21} > 0; \frac{dT}{dP} < 0.$$

$dP > 0 \rightarrow dT < 0$ - за зростання $F(\vec{r}, t)$ зменшується.

$dP < 0 \rightarrow dT > 0$ - під час зменшення $P, T_{\text{плав}}$ зростає.

Всі розглянуті нами наслідки рівняння Клапейрона-Клаузіуса знаходяться у повній відповідності з принципом Ле-Шательє, який

формується так: *зовнішня дія, що виводить тіло з рівноваги викликає в цьому тілі такі процеси, що намагаються ослабити результати цієї дії.*

Розглянемо рідину, що перебуває в рівновазі зі своєю насиченою парою. Якщо в таку систему додати певну кількість теплоти, порушивши тоді рівновагу, то в результаті цього частина рідини перетвориться в пару і рівновага у цьому випадку знову відновиться, тобто система ніби протидіє тій дії, що виводить її з рівноваги.

Розглянемо частинний випадок формули (76.9), коли мова йде про рівновагу швидкості тіла, чи рідини з її парою. Формула (77.9) визначає тоді зміну тиску насиченої пари з температурою, тобто $V_{0_2} \gg V_{0_1}$ (V_{0_2} - молекулярний об'єм насиченої пари).

Тоді

$$\frac{dP}{dT} = \frac{q}{TV_{0_2}}. \quad (77.12)$$

Вважаємо насичену пару ідеальним газом. Тоді з рівняння (77.5)

$$V_{0_2} = \frac{V}{N} = \frac{kT}{P}. \quad (77.13)$$

З рівняння Клапейрона-Клаузіуса маємо:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{qP}{kT^2} \quad (77.14)$$

або

$$\frac{dP}{P} = \frac{q}{kT^2} dT. \quad (77.15)$$

Вважаючи, що теплота переходу в даному процесі від температури не залежить, після інтегрування отримаємо:

$$\ln P = \frac{q}{kT} + \ln C. \quad (77.16)$$

Пропотенціюємо вираз (76.16), отримаємо:

$$P = Ce^{\frac{q_k}{kT}}. \quad (77.17)$$

Вираз (77.12) показує, що тиск P насиченої пари в залежності від температури T змінюється за експоненціальним законом. Експоненціальна залежність типу (77.17) називається *активаційною залежністю* або *арфеніусівською*. Виявляється, що швидкість хімічних реакцій описується законом Арфеніуса, який має схожий вигляд.

Лекція 23. ОСОБЛИВОСТІ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ

§78. Критична точка. Рівновага трьох фаз речовини. Потрійна точка.

§79. Багатокомпонентні системи. Правило фаз Гіббса.

§80. Фазові переходи 1-го і 2-го роду. Поведінка термодинамічних величин та їх похідних у фазових переходах.

[1. §2.4-§2.6; 2. §8.4, §8.7, §8.8; 5. §4.6, §4.8; 6. §61-§62; 7. §59-§61, §64; 8. §V.3-V.5]

§78. Критична точка. Рівновага трьох фаз речовини. Потрійна точка

1. Критична точка.

Крива рівноваги двох фаз може закінчуватися в деякій точці, така точка називається *критичною*, а відповідні їй значення $T_{кр}$ і $P_{кр}$ називаються *критичною температурою* і *критичним тиском*. З графіка видно (рис. 63), що для $P > P_{кр}$ і $T > T_{кр}$ не існує більше двох фаз речовини (різниці між двома фазами речовини), тобто не існує різних фаз і тіло завжди однорідне. Поняття про критичну точку вперше було введено Д.І. Менделєєвим.

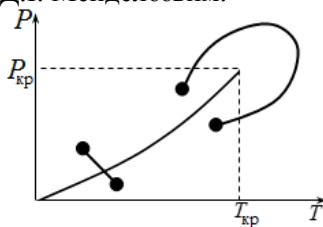


Рис. 63

Очевидно, що коли між двома фазами речовини на кривій фазової рівноваги існує критична точка, то між цими фазами можна здійснити неперервний перехід так, що ні в який момент часу система не буде розпадатись на дві фази. Взагалі кажучи, про дві фази можна говорити лише тоді, коли вони існують обидві одночасно, дотикаючись одна до другої, тобто, в точках, що лежать на кривій рівноваги. Для такого трактування критичної точки поняття двох різних фаз речовини стає умовним. Про фазовий перехід можна

говорити лише тоді, коли параметри P і T змінюються так, що лінія їх зміни перетинає криву фазового переходу. Зрозуміло, що критична точка може існувати тільки для таких фаз, різниця в русі молекул між якими носить тільки кількісний характер, а саме: рух молекул в рідкій і газоподібній фазах хаотичний, тобто характер руху однаковий, але швидкості молекул та віддалі між ними різні.

Зауваження: критична точка ніколи не може існувати між такими фазами в яких різниця у русі молекул носить якісний характер. Такими фазами є тільки рідка та газоподібна фази, коли і в одній, і в іншій фазах рух молекул хаотичний. Ці фази відрізняються одна від одної лише більшою або меншою величиною взаємодії між молекулами. Наприклад, рідина - кристал, газ - кристал.

Оскільки в кристалі атоми розміщені впорядковано і здійснюють коливні рухи, а в рідині та газі рухи хаотичні. Тоді кажуть, що в кристалі розміщення атомів має певні властивості симетрії. А симетрія це така властивість, яка може або існувати, або не існувати. Таким чином, для таких фаз, різниця між якими має якісний характер, критична точка не може існувати, крива рівноваги між кристалом і рідиною, кристалом та газом або йде в нескінченність, або закінчується, перетинаючись з кривими рівноваги інших фаз.

2. Рівновага трьох фаз. Потрійна точка.

Розглянемо рівновагу трьох фаз речовини. Нехай крива рівноваги двох фаз задається рівнянням:

$$\mu_1(P, T) = \mu_2(P, T). \quad (78.1)$$

Крива рівноваги другої і третьої фази задається рівнянням:

$$\mu_2(P, T) = \mu_3(P, T). \quad (78.2)$$

У точці, де криві рівноваги цих фаз перетинаються, можуть одночасно існувати в рівновазі три фази. Тобто будуть виконуватися співвідношення:

$$\mu_1(P_0, T_0) = \mu_2(P_0, T_0) = \mu_3(P_0, T_0). \quad (78.3)$$

Така точка на P, T площині називається *потрійною* і в ній одночасно перебувають у рівновазі три фази речовини (рис. 64). Отже, в потрійній точці перетинаються три криві, що зображають рівновагу 1-ої і 2-ої, 2-ої і 3-ої та 1-ої і 3-ої фаз.

Параметри потрійної точки P_0, T_0 можуть бути задані з системи рівнянь (78.3). Наприклад, діаграма станів для води. Параметри потрійної точки для води наступні: $P_0 = 0,006$ атм; $T_0 = 0,0078$ °С. Саме за таких значень температури та тиску рідка вода, лід і водяна

пара будуть знаходитись у рівновазі.

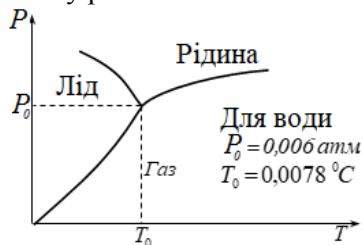


Рис. 64

Проаналізуємо тепер загальні властивості діаграм станів (рис. 65) та (рис. 66). З діаграми станів видно, що для $T < T_0$ кристал можна розплавити для сталої температури за рахунок збільшення тиску (навіть не нагріваючи), а для тисків $P < P_0$ нагрівання кристалу призводить до переходу його в газоподібний стан (сублімація). Наприклад, лід, нафталін, сухий лід.



Рис. 65



Рис. 66

Потрійна точка не обов'язково описує рівновагу кристалічної, рідкої та газоподібної фаз. Вона може описувати рівновагу двох кристалічних і рідкої або трьох фаз. Наприклад, лід H_2O може перебувати більше ніж в трьох кристалічних фазах (при $P \approx 2000$ атм).

Для прикладу розглянемо більш детально діаграму хлористого цезію CsCl , який може утворювати 4 фази (рис. 67).

На рисунку 67 приведені розташування фазових областей, а саме:

- 1 - область, де стійкою є газоподібна фаза;
- 2 - область існування рідкої фази;
- 3, 4 - області існування різних кристалічних фаз.

A, B, C, - потрійні точки.

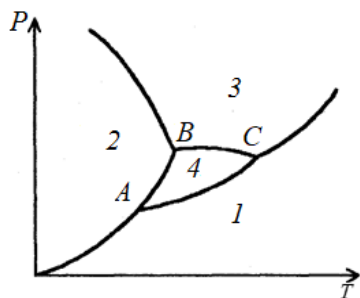


Рис. 67

Хлористий цезій може кристалізуватись, маючи кристалічну решітку типу кам'яної солі (фаза (4)), а також - об'ємноцентровану кристалічну ґратку (фаза (3)). З фазової діаграми видно, що хлористий цезій має три потрійні точки.

Єдина речовина, яка не має потрійної точки - це гелій. Тобто для гелію рівновага твердої, рідкої і газоподібної фаз взагалі неможлива.

Діаграма станів його показана на рисунку 68. Надтекучий гелій (^4He) був відкритий у 1938 році вченим Капіцею.

Зауваження: до кривих рівноваги фаз примикають області метастабільних станів. Наприклад, в області за певних умов може існувати переохолоджена рідина.

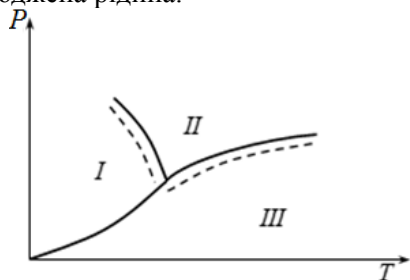


Рис. 68

В області III, де стійким є газоподібний стан, може за певних умов існувати перегріта рідина. Фізична природа існування метастабільних станів зв'язана з поведінкою молекул у вузькому приповерхневому шарі, що розділяє дві фази. Товщина цього шару близька до величини радіуса молекулярної взаємодії.

Відзначимо тепер загальні особливості діаграми станів. Крива

рівноваги рідкої і газоподібної фаз закінчується в критичній точці ($P_{кр}, T_{кр}$), в якій зникає різниця між рідким та газоподібним станами речовини. Крива рівноваги між твердою (кристалічною) та газоподібною фазами для всіх речовин, крім гелію, підходить до початку координат. Експериментально встановлено, що для кривої рівноваги між рідкою та твердою фазами критичної точки не існує. Очевидно, що ця крива ніде не обривається, а йде до нескінченності, оскільки є принципова різниця між кристалічною (симетричною) фазою і рідкою (несиметричною) фазою та перехід між такими фазами може відбутися лише шляхом фазового переходу.

§79. Багатокомпонентні системи. Правило фаз Гіббса

До цього часу ми розглядали рівновагу фаз в хімічно-однорідній системі, тобто такій, що складається з однієї хімічної сполуки, яка могла перебувати в різних фазах. Такі системи ми будемо називати *однокомпонентними*. Наприклад, рівновага у системі лід-вода-водяна пара, причому всі фази належать до однієї хімічної сполуки - H_2O .

Розглянемо тепер багатокомпонентні системи, тобто такі, що складаються з кількох хімічних сполук, кожна з яких може перебувати в різних фазах (хімічні сполуки між собою не взаємодіють). Наприклад, розчин солі у воді - двокомпонентна система. Ця система є двокомпонентною (оскільки містить дві хімічні сполуки - $NaCl$ та H_2O) і однофазною (через те, що обидві сполуки знаходяться в рідкій фазі). Якщо ж розчин буде насиченим і з нього почнуть випадати кристалики солі, то система стане фізично неоднорідною та складатиметься з двох фаз - рідкої і кристалічної. Але в хімічному відношенні вона залишиться двокомпонентною (H_2O та $NaCl$).

Розглянемо рівновагу фаз в багатокомпонентних системах. Нехай в системі є n -компонентів, кожна з яких може бути в r фазах. Тоді припустимо, що в будь-якій фазі можуть бути всі компоненти. Кожну фазу будемо характеризувати тиском P , температурою T і μ - хімічними потенціалами. Умова рівноваги фаз буде представляти собою рівність тисків і температур в усіх фазах та рівність їх хімічних потенціалів.

Виявляється, що в такій багатокомпонентній системі число фаз, які знаходяться в рівновазі між собою, не може бути довільним, а залежить певним чином від числа компонентів системи. Встановимо

тепер цю залежність. Як ми вже з'ясували, умовою рівноваги фаз у однокомпонентній системі є рівність температур, тисків і хімічних потенціалів в усіх фазах. Очевидно, що в загальному випадку кількох компонентів умовою рівноваги фаз буде рівність температур T , тисків P і хімічних потенціалів у всіх фазах кожного компонента. Якщо μ_n^r - хімічний потенціал r -ої фази n -ого компонента, то умови рівноваги фаз можна записати у вигляді:

$$\left. \begin{array}{l} \xrightarrow{\text{Фаза}} \\ \xrightarrow{\text{Компонента}} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \mu_1^I = \mu_1^{II} = \dots \mu_1^r \\ \mu_2^I = \mu_2^{II} = \dots \mu_2^r \\ \dots\dots\dots \\ \mu_n^I = \mu_n^{II} = \dots \mu_n^r \end{array} \quad (79.1)$$

Система рівнянь (79.1) - це система $n(r-1)$ рівнянь з кількістю невідомих $\sum_{P,T} + r(n-1)$.

Число частинок у всіх компонентах $N_1 + N_2 + \dots + N_n = N$. Розділимо на V , отримаємо концентрацію:

$$n_1 + n_2 + \dots + n_n \rightarrow n.$$

У нас є n невідомих, тому що у нас є $n-1$ невідома концентрація, кожна з яких може бути в r фазах, тобто є $r(n-1)$ невідомих. Для того, щоб система мала розв'язок необхідно, щоб число рівнянь було не більше за число невідомих

$$n(r-1) \leq 2 + r(n-1), \quad (79.2)$$

$$nr - n \leq 2 + rn - r. \quad (79.3)$$

В результаті отримаємо:

$$r \leq n + 2. \quad (79.4)$$

Співвідношення (79.4) виражає так зване *правило фаз Гіббса*. Воно показує, що в багатокомпонентній системі одночасно в рівновазі може бути не більше чим $n+2$ фази. Якщо маємо однокомпонентну систему, коли $n=1$, то звідси слідує, що $r \leq 3$, тобто в однокомпонентній системі може бути не більше трьох фаз.

Правило фаз Гіббса можна отримати й іншим шляхом. Якщо число незалежних рівнянь $n(r-1)$ менше числа незалежних невідомих $2 + r(n-1)$, то різниця

$$R = 2 + r(n-1) - n(r-1) = 2 + n - r \quad (79.5)$$

даватиме число вільних параметрів, які можна змінювати, не порушуючи рівноваги в системі. Величину R називають *це числом термодинамічних ступенів вільності*. Оскільки завжди $R \geq 0$, то $r \leq n + 2$, тобто отримуємо, як і раніше, правило фаз Гіббса. Якщо ж

число r фаз, що існують одночасно, менше, ніж $n + 2$, то в рівнянні (79.5) ці $R = n + 2$ змінних можуть, звичайно, мати довільні значення. Наприклад, для однокомпонентної системи ($n + 2$) маємо

$$R = 3 - r, r \leq 3. \quad (79.6)$$

Якщо $r = 1$, то $R = 2$, тобто довільні значення можуть мати два параметри: тиск P та температура T . У випадку $r = 2$ ми будемо знаходитись на кривій рівноваги двох фаз, тоді $R = 1$. Це означає, що тільки один параметр - тиск P або температура T може бути незалежним, а інший можна знайти з рівняння кривої фазової рівноваги $P = P(T)$ або $T = T(P)$.

Якщо ж $r = 3$, то $R = 0$. У цьому випадку ми будемо знаходитись у потрійній точці, коли тиск і температура набувають значень P_0 та T_0 , які визначаються з розв'язку системи рівнянь (79.4).

Отже, система із трьох фаз і однієї компоненти не має вільних параметрів. Рівновага трьох фаз (вода, лід і пара) настає тільки за певних значень всіх термодинамічних величин в потрійній точці. Система з чотирьох фаз одного і того ж хімічного складу взагалі не може знаходитись у рівновазі.

§80. Фазові переходи 1-го і 2-го роду. Поведінка термодинамічних величин та їх похідних у фазових переходах

1. У тих фазових переходах, що були розглянуті в попередніх параграфах, хімічний потенціал для обох фаз був однаковим: $\mu_1(P, T) = \mu_2(P, T)$. А похідні від хімічного потенціалу за температурою та тиском $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = -\frac{S}{N} = -S_0$, $\left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = \frac{V}{N} = V_0$, що мали зміст молекулярної ентропії та молекулярного об'єму у фазовому переході змінювалися стрибком. Тобто, молекулярні ентропії і молекулярні об'єми в обох фазах не були рівні між собою:

$$S_{01} \neq S_{02}, V_{01} \neq V_{02}. \quad (80.1)$$

Такі фазові переходи називають *фазовими переходами 1-го роду*.

Таким чином, фазові переходи 1-го роду супроводжуються скачкоподібною зміною об'єму і поглинанням або виділенням теплоти переходу. До таких переходів належать всі зміни агрегатного стану (кипіння, плавлення і т.д.) і багато взаємних перетворень кристалічних модифікацій однієї і тієї ж речовини одна в одну. Фазові переходи 1-го роду описуються рівнянням Клапейрона-

Клаузіуса (77.9).

2. Крім фазових переходів 1-го роду можливими є і такі фазові переходи, для яких перші похідні від хімічного потенціалу за температурою та тиском не мають стрибків в точці переходу, тобто, $S_{01} \neq S_{02}$, $V_{01} \neq V_{02}$. Але другі похідні

$$\left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2}\right)_P = -\frac{C_P}{T}, \quad (80.2)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial P^2}\right)_T = \left(\frac{\partial V_0}{\partial P}\right)_T = -V_0 \beta_T, \quad (80.3)$$

$$\frac{\partial^2 \mu}{\partial P \partial T} = \left(\frac{\partial V_0}{\partial T}\right)_P = V_0 \alpha_T \quad (80.4)$$

мають в точці фазового переходу скінченні розриви. Такі фазові переходи називають *фазовими переходами 2-го роду*. Отже, у фазових переходах 2-го роду не відбувається стрибкоподібної зміни об'єму і поглинання або виділення теплоти переходу, але стрибком змінюється стисливість β_T , коефіцієнт об'ємного розширення α_T і теплоємність C_P .

Фазові переходи 2-го роду частіше всього пов'язані з стрибкоподібною зміною яких-небудь властивостей симетрії тіла. За рахунок переходу 2-го роду може відбуватись також перехід магнетика з феромагнітного стану в парамагнітний, перехід металу в надпровідний стан (при відсутності магнітного поля) і перехід рідкого гелію в надтекучий стан. В обох останніх випадках стан тіла змінюється неперервним чином, але в точці переходу тіло набуває якісно нової властивості.

Через те, що рівняння Клапейрона-Клаузіуса для фазових переходів 2-го роду не має змісту (бо його права частина перетворюється у невизначеність типу 0/0, то для таких переходів можна отримати формули, що замінюють рівняння Клапейрона-Клаузіуса.

Якщо позначити через

$$[A] = A_2 - A_1$$

стрибок величини A у переході з однієї фази у другу під час фазового переходу 2-го роду, то для похідної $\frac{dP}{dT}$ вздовж кривої фазової рівноваги можна отримати два еквівалентних вирази

$$\frac{dP}{dT} = - \frac{\left[\left(\frac{\partial V_0}{\partial T} \right)_P \right]}{\left[\left(\frac{\partial V_0}{\partial P} \right)_T \right]}, \quad (80.5)$$

$$\frac{dP}{dT} = \frac{[C_P]}{\left[\left(\frac{\partial V_0}{\partial T} \right)_P \right]}. \quad (80.6)$$

Сукупність цих рівнянь навівають *рівняннями Еренфеста*. Саме рівняння (80.5) та (80.6) описують фазові переходи 2-го роду.

Лекція 24. КАНОНІЧНІ РОЗПОДІЛИ В КВАНТОВІЙ СТАТИСТИЦІ

§81. Визначення мікростану системи в квантовій статистичній фізиці.

§82. Мікроканонічний розподіл в квантовій статистичній фізиці.

§83. Квантовий канонічний розподіл Гіббса.

§84. Великий квантовий канонічний розподіл Гіббса.

[3. §8; 5. §63-§66]

§81. Визначення мікростану системи в квантовій статистичній фізиці

В класичній статистичній фізиці мікростан системи задавався з допомогою сукупності величин q і p , координатами і проекціями імпульсів всіх частинок системи. Але з квантової механіки відомо, що однойменні координати і проекції імпульсів в силу співвідношення невизначеності Гейзенберга не можуть бути виміряні одночасно абсолютно точно

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar; \quad \Delta q_i \cdot \Delta p_i \geq \hbar.$$

Тому з врахуванням курпускулярно-хвильових властивостей частинок класичне визначення мікростану втрачає зміст. Отже, в квантовій механіці мікростан системи задається за допомогою хвильової функції системи $\psi(q_1, q_2, \dots, q_s, t)$. Хвильова функція системи знаходиться з рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad (81.1)$$

де $\hat{H}$ - оператор Гамільтона, оператор повної енергії системи.

Оператор повної енергії системи записується

$$\hat{H} = \hat{H}(q, \hat{p}) \quad (81.2)$$

та будується за принципом: в функції Гамільтона робиться заміна

$$\begin{aligned} q &\Rightarrow \hat{q} = q, \\ p &\Rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}. \end{aligned} \quad (81.3)$$

Таким чином, оператор Гамільтона це є:

$$\hat{H} = \hat{H}\left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\right). \quad (81.4)$$

Висновок. Мікростан системи визначається хвильовою функцією, яка знаходиться як розв'язок рівняння Шредінгера.

§82. Мікроканонічний розподіл в квантовій статистичній фізиці

Розглянемо ізольовану систему, оператор Гамільтона якої $\hat{H}$, тоді всі можливі мікростани такої системи знайдуться з рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad (82.1)$$

де $E_n = E$ - енергія ізольованої системи.

Тоді сукупність власних хвильових функцій можна записати у вигляді:

$$\psi_n = \{\psi_n\}. \quad (82.2)$$

Тобто рівність (82.2) представляє собою сукупність всіх можливих мікростанів ізольованої системи.

Якщо одному власному значенню енергії (наприклад, E_n), відповідає Ω_{E_n} хвильових функцій, то кажуть, що енергетичний рівень E_n вироджений з кратністю Ω_{E_n} (рис. 69).

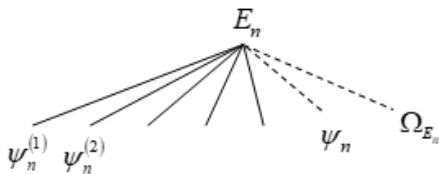


Рис. 69

Для макроскопічної ізольованої системи Ω_{E_n} дуже велике число, оскільки дане значення енергії системи може бути утворене дуже

великим числом комбінацій енергії окремих частинок. Причому система в цілому перебуває в одному з мікростанів з набору $\{\psi_n\}$. Оскільки ідеальної ізольованої системи не існує, то завдяки слабкій взаємодії з оточуючим середовищем система буде переходити з одного мікростану в інший, що належить даному набору. Для макросистеми знайти зміну її мікростану з часом так же важко як і для класичної знайти фазову траєкторію. Тому в квантовій статистиці, так само як і в класичній використовують статистичні закономірності та вводять функцію розподілу W_n , яка має такий фізичний зміст: *вона задає ймовірність того, що система перебуває в певному мікростані з хвильовою функцією ψ_n .*

Зауваження: в класичній статистиці функція розподілу задає густину ймовірності, а тут - ймовірність, бо вона є дискретною величиною.

В квантовій статистиці, так само як і в класичній можна ввести ергодну гіпотезу: *всі ізольовані мікростани рівноймовірні під час перебування системи в стані термодинамічної рівноваги.* Якщо цих мікростанів є Ω_{E_n} , то мікроканонічний розподіл, що виражає рівноймовірність попадання в будь-який із станів має вигляд:

$$W = \frac{1}{\Omega_{E_n}}, \quad (82.3)$$

де Ω_{E_n} - кратність виродження.

Вираз (82.3) задає ймовірність реалізації будь-якого з мікростанів.

§83. Квантовий канонічний розподіл Гіббса

Розглянемо систему в термостаті. Нехай можливі енергетичні рівні такої системи утворюють сукупність:

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots, \quad (83.1)$$

а можливі мікростани, що відповідають цим рівнянням утворюють сукупність:

$$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots \quad (83.2)$$

Якщо всі енергетичні рівні не вироджені, то кожному рівні E_n відповідає одна хвильова функція ψ_n . Взагалі кажучи енергетичні рівні можуть бути вироджені так, що кожному енергетичному рівню E_n може відповідати Ω_{E_n} хвильових функцій (рис. 70).

Розглядаючи систему і термостат, як велику ізольовану систему, можна для неї записати мікроканонічний розподіл і проінтегрувати по

змінних термостата та отримати функцію розподілу для системи в термостаті методом подібним до класичного.

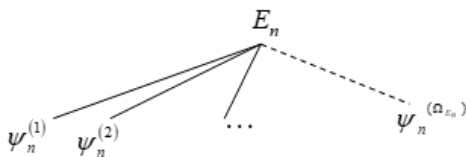


Рис. 70

Ця функція розподілу має вигляд:

$$W_n = C \cdot e^{-\frac{E_n}{\theta}}, \quad (83.3)$$

де C - нормуюча константа.

Фізичний зміст: W_n - дає ймовірність того, що система в термостаті перебуває в довільному мікростані $\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}, \dots, \psi_n^{(\Omega_{E_n})}$ з енергією E_n .

Як і в класичній статистиці можна ввести нову нормуючу константу

$$C = \frac{1}{Z} \quad (83.4)$$

і записати канонічний розподіл Гібса у вигляді:

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{\theta}}, \quad (83.5)$$

де Z - статистична сума, яку легко знайти з умови нормування канонічного розподілу Гіббса.

Запишемо умову нормування:

$$\frac{1}{Z} \sum_{\text{по всіх мікростанах}} e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \frac{1}{Z} \sum_{\text{по всіх енергіях}} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \Omega_{E_n} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \Omega_{E_n} = 1. \quad (83.6)$$

Таким чином, статистичну суму з виразу (83.6) можна записати в такому вигляді:

$$Z = \sum_{\text{по всіх мікростанах}} e^{-\frac{E_n}{\theta}} = \sum_{\text{по всіх енергіях}} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \Omega_{E_n}. \quad (83.7)$$

Як і в класичній статистиці можна ввести вільну енергію

$$\frac{1}{Z} = e^{\frac{F}{\theta}}. \quad (83.8)$$

Тоді

$$W_n = e^{\frac{F-E_n}{\theta}}, \quad (83.9)$$

де F - вільна енергія система, тобто характеристична функція.

Поряд з вільною енергією можна ввести й інші характеристичні функції. Таким чином, можна знайти всі термодинамічні співвідношення, які і в квантовій статистиці залишаються незмінними. Вся різниця між класичною і квантовою статистикою полягає лише в способі обчислення Z . В квантовій статистиці - це сума, в класичній статистиці - це інтеграл. В формулі (83.9) немає необхідності вводити $\frac{1}{N!}$, оскільки в принцип тотожності мікрочастинки уже враховані у хвильовій функції.

Розглянемо тепер як проводиться усереднення фізичної величини за допомогою квантово-механічного розподілу. Нехай ϵ фізична величина L , треба знайти $\bar{L}$, для простоти будемо вважати, що всі енергетичні рівні системи невироджені. Нехай система перебуває в стані з хвильовою функцією ψ_n . Виявляється, що взагалі кажучи у даному стані відповідна фізична величина може і не мати певного значення. Так, що має зміст говорити тільки про середнє значення $\bar{L}$ в даному мікростані ψ_n . Це середнє значення знаходиться за формулою:

$$L_{nn} = \int \psi_n^* \hat{L} \psi_n d\tau, \quad (83.10)$$

$$d\tau = dq_1 dq_2 \dots dq_s, \quad (83.11)$$

$$\hat{L} = \hat{L}(\hat{q}, \hat{p}). \quad (83.12)$$

Кажуть, що вираз (83.10) дає квантово - механічне середнє в мікростані з хвильовою функцією ψ_n . Легко бачити, що якщо ψ_n є власною хвильовою функцією оператора L , тобто

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n, \quad (83.13)$$

то тоді квантово-механічне L в даному мікростані

$$L_{nn} = \int \psi_n^* L_n \psi_n d\tau = L_n \int \underbrace{\psi_n^* \psi_n}_{=1} d\tau = L_n. \quad (83.14)$$

Тобто L_{nn} співпадає з власним значенням оператора L_n , тоді квантово статистичне середнє значення фізичної величини обчислюється за правилом

$$\bar{L} = \sum_{\substack{n \\ \text{(за всіма} \\ \text{мікростанами)}}} W_n L_{nn} = \sum_{\substack{\text{за всіма} \\ \text{мікростанами}}} e^{\frac{F-E_n}{\theta}} L_{nn}. \quad (83.15)$$

Взагалі співвідношення (83.15) є повним аналогом відповідного класичного виразу. Вираз (83.15) містить квантово-механічне і

квантово-статистичне усереднення. Зручно вираз (83.15) переписати у такому вигляді, використовуючи відомі формули з квантової механіки:

$$e^{\frac{F-E_n}{\theta}} L_{nn} = \left(e^{\frac{F-\hat{H}}{\theta}} \hat{L} \right)_{nn}. \quad (83.16)$$

За означенням

$$(\hat{A}\hat{B})_{nn} = \sum_i (\hat{A})_{ni} (\hat{B})_{in}. \quad (83.17)$$

Користуючись виразом (83.17), $\bar{L}$ можна представити у вигляді:

$$\bar{L} = \sum_n \left(e^{\frac{F-\hat{H}}{\theta}} \hat{L} \right)_{nn}. \quad (83.18)$$

Виходячи із наступного позначення, можна отримати ще й такий вираз:

$$\sum (\hat{A})_{nn} = \text{Sp } \hat{A}, \quad (83.19)$$

де запис $\text{Sp } \hat{A}$ - читається, як шпур оператора $\hat{A}$.

В формулі (83.19) - це сума діагональних елементів матриці $\hat{A}$.
Тоді

$$\bar{L} = \text{Sp} e^{\frac{F-\hat{H}}{\theta}} \hat{L}. \quad (83.20)$$

Зручність запису виразу (83.20) в тому, що як доводиться у квантовій механіці використовувати знак Sp довільного оператора, то він інваріантний відносно системи функцій, які дають можливість його обчислити.

§84. Великий квантовий канонічний розподіл Гіббса

Розглянемо систему із змінним числом частинок N . В цьому випадку оператор Гамільтона буде залежати від такого ж числа частинок. А отже, власні значення і власні функції його теж будуть залежати від числа частинок. Так, що загальне рівняння Шредінгера можна записати у вигляді:

$$\hat{H}\psi_k(N, q) = E_k(N)\psi_k(N, q), \quad (84.1)$$

де k - набір квантових чисел, які визначають хвильову функцію системи, тобто її мікростан. Тоді для такої системи із змінним числом частинок можна одержати функцію розподілу:

$$W_k(N) = e^{\frac{\Omega + \mu N - E_k(N)}{\theta}}, \quad (84.2)$$

де μ - хімічний потенціал системи; Ω - характеризується функція, яка знайдена з умови нормування великого канонічного розподілу

$$C = e^{\frac{\Omega}{\theta}}. \quad (84.3)$$

Великий канонічний розподіл Гіббса (84.2) має такий фізичний зміст: він дає ймовірність того, що система із змінним числом частинок перебуває у мікростані з хвильовою функцією $\psi_k(N, q)$, який характеризується числом частинок N і цією ж хвильовою функцією.

Інакше кажучи, великий канонічний розподіл Гіббса (84.2) дає ймовірність реалізації певного мікростану з певною хвильовою функцією і певними значеннями енергії.

Умова нормування великого канонічного розподілу Гіббса має такий вигляд:

$$\sum_{\substack{\text{за всіма} \\ \text{мікростанами}}} e^{\frac{\Omega + \mu N - E_k(N)}{\theta}}. \quad (84.4)$$

Аналогічно до попереднього параграфу можна записати середнє значення за великим канонічним ансамблем Гіббса і отримати аналогічне співвідношення. У практичних задачах обчислювати середнє за великим канонічним ансамблем Гіббса набагато зручніше, оскільки не треба фіксувати число частинок. В системі, яка перебуває в термостаті, причому число частинок у ній змінне, проявляється цікава властивість, а саме, якщо ця система перебуває в стані рівноваги з термостатом, то число частинок N виявляється рівним $\bar{N}$:

$$N = \bar{N}. \quad (84.5)$$

Це дає можливість під час обчислень середнього значення користуватись як канонічним розподілом Гіббса так і великим канонічним розподілом Гіббса, тобто в такій рівноважній системі є можливість взаємозаміни канонічного і великого канонічного розподілу Гіббса. Ця властивість буде використана нами для виведення квантового розподілу Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.

Лекція 25. ЗАКОНОМІРНОСТІ КВАНТОВОЇ СТАТИСТИКИ

§85. Квантовий ідеальний газ.

§86. Симетричні та антисиметричні стани.

§87. Числа заповнень.

[1. §7.4, §7.5; 2. §5.2, §5.3; 3. §15, §16; 6. §67-§69]

§85. Квантовий ідеальний газ

Розглянемо ідеальний газ, що займає об'єм V , містить N частинок і якому істотні квантові закономірності, такий газ будемо називати *квантовим ідеальним газом*. Функція гамільтона для такого газу буде мати вигляд:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad (85.1)$$

де $\hat{H}_i$ - оператор Гамільтона i -тої частинки.

Якщо всі частинки однакові, то оператори Гамільтона однакові для всіх частинок і будуть відрізнятися тільки змінними на які вони діють.

Знайдемо тепер власні функції і власні значення енергії для ідеального газу з рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi_\alpha = E_\alpha\psi_\alpha, \quad (85.2)$$

де α - набір квантових чисел, що визначають квантову функцію.

$$\psi_\alpha = \psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N). \quad (85.3)$$

Розглянемо тепер власні значення і власні функції оператора Гамільтона для однієї i -тої частинки, тобто розв'яжемо рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_i\varphi_k(\vec{r}_i) = \mathcal{E}_k\varphi_k(\vec{r}_i). \quad (85.4)$$

Таке рівняння має цілу сукупність власних функцій

$$\varphi_1(\vec{r}_i), \varphi_2(\vec{r}_i), \dots, \varphi_k(\vec{r}_i) \dots, \quad (85.5)$$

яким відповідає сукупність власних значень енергій:

$$\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_k, \dots. \quad (85.6)$$

Функції $\varphi_k(\vec{r})$ ми будемо називати *одночастинковими власними функціями*. А відповідні їм власні значення енергії - *одночастинковими власними значеннями енергії*.

Зауважимо, що спектр одночастинкових власних функцій і власних значень для всіх частинок однаковий, так як однакові значення операторів Гамільтона.

Зауваження: взагалі всі задачі, які розглядаються нами в квантовій механіці давали нам одночастинкові значення функцій і енергій. Іншими словами, кожна частинка ідеального газу може перебувати в одному стані з власними значеннями функцій

$$\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k, \dots \quad (85.7)$$

і з власними значеннями енергій

$$\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_k, \dots \quad (85.8)$$

Повернемось тепер до розв'язку рівняння Шредінгера (85.2). Легко переконатися, що рівнянню Шредінгера (85.2) задовольняє хвильова функція ψ_α , яка є добутком одночастинкових власних функцій

$$\psi_\alpha = \psi_{i,k,\dots,l}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \varphi(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) \dots \varphi_l(\vec{r}_N). \quad (85.9)$$

Причому відповідні значення енергії є

$$E_{i,k,\dots,l} = \mathcal{E}_i + \mathcal{E}_k + \dots + \mathcal{E}_l. \quad (85.10)$$

Кажуть, що хвильова функція (85.9) задовольняє рівнянню Шредінгера (85.2) з власними значеннями (85.10). Щоб переконатися в цьому необхідно вираз (85.9) підставити у вираз (85.2). Для простоти, зробимо це для системи, що складається з двох частинок. В цьому випадку

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (85.11)$$

а хвильова функція

$$\psi_{ik}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2). \quad (85.12)$$

Після підстановки, рівняння Шредінгера буде мати такий вигляд:

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) = \varphi_k(\vec{r}_2)\hat{H}_1\varphi_i(\vec{r}_1) + \varphi_i(\vec{r}_1)\hat{H}_2\varphi_k(\vec{r}_2) = \\ = \varphi_k(\vec{r}_2)\mathcal{E}_i\varphi_i(\vec{r}_1) + \varphi_i(\vec{r}_1)\mathcal{E}_k\varphi_k(\vec{r}_2) = (\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_k)\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2). \quad (85.13)$$

Таким чином, на прикладі двох частинок ми показали, що рівнянню Шредінгера із двох частинок задовольняє хвильова функція (85.12) складена з добутку одночастинкових власних функцій та власних значень енергії, що дорівнюють сумі одночастинкових значень енергій.

§86. Симетричні та антисиметричні стани

З попереднього параграфу ми вияснили, що розв'язком рівняння Шредінгера для ідеального газу є хвильова функція складена з добутку відповідних одночастинкових функцій, причому власні значення енергії представляють собою суму одночастинкових власних значень. Виявляється, що хоча функція типу (85.9) і задовольняє рівняння Шредінгера (85.2), але вона не описує ніякого реального стану в системі і отже, не являється хвильовою функцією реальної системи. Як слідує з квантової механіки, квантовій системі тотожних частинок повинна задовольняти така умова:

$$\psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \vec{r}_k, \dots, \vec{r}_N) = \pm \psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N). \quad (86.1)$$

Тобто за заміни місцями двох частинок хвильова функція повинна

змінювати або не змінювати свій знак. Хвильова функція, яка не змінює свого знаку під час заміни місцями двох частинок називається *симетричною*, а якщо змінює свій знак - *антисиметричною*.

Таким чином, реальні квантові стани в системі однакових частинок описуються або симетричними, або антисиметричними хвильовими функціями. Виявляється, що симетрія або антисиметрія залежить від природи частинок. Ті частинки спин, в яких напівцілий називається *ферміонами* і описується *антисиметричними хвильовими функціями*. Частинки спин, в яких цілий називаються *бозонами* і описуються *симетричними хвильовими функціями*.

Розглянемо розв'язок рівняння Шредінгера для системи двох частинок. Якщо ці частинки ферміони, то їх хвильова функція повинна задовольняти умові:

$$\psi_{ik}^{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi_{ik}(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (86.2)$$

Легко переконатись, що антисиметрична хвильова функція в цьому випадку буде мати вигляд:

$$\psi_{ik}^{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1). \quad (86.3)$$

Переконаємось, для цього вираз (86.3) підставимо в рівняння Шредінгера:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_{ik}^{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\{\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1)\} = \\ &= \varphi_k(\vec{r}_2)\hat{H}_1\varphi_i(\vec{r}_1) - \varphi_i(\vec{r}_2)\hat{H}_1\varphi_k(\vec{r}_1) + \varphi_i(\vec{r}_1)\hat{H}_2\varphi_k(\vec{r}_2) - \varphi_k(\vec{r}_1)\hat{H}_2\varphi_i(\vec{r}_2) = \\ &= \mathcal{E}_i\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \mathcal{E}_k\varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1) + \mathcal{E}_k\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \mathcal{E}_i\varphi_k(\vec{r}_1)\varphi_i(\vec{r}_2) = \\ &= (\mathcal{E}_i + \mathcal{E}_k)((\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1))). \end{aligned} \quad (86.4)$$

Дана антисиметрична функція задовольняє рівнянню Шредінгера з власним значенням

$$E_{ik} = \mathcal{E}_i + \mathcal{E}_k. \quad (86.5)$$

З співвідношення (86.3) зразу видно, що вона антисиметрична

$$\begin{aligned} \psi_{ik}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) &= \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1) - \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) = \\ &= -\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1) = -\psi_{ik}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \end{aligned} \quad (86.6)$$

Якщо частинки бозони, то хвильова функція двох бозонів:

$$\psi_{ik}^B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2) + \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_k(\vec{r}_1). \quad (86.7)$$

В загальному випадку для системи багатьох частинок, наприклад, ферміонів можна записати:

$$\psi_{i,k,\dots,l}^{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \hat{A}\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_k(\vec{r}_2)\dots\varphi_l(\vec{r}_N), \quad (86.8)$$

де $\hat{A}$ - оператор антисиметризації хвильових функцій.

Для випадку системи двох бозонів, замість оператора антисиметризації $\hat{A}$ використовують оператор симетризації $\hat{S}$ хвильових функцій. Тобто хвильова функція системи бозонів має

такий вигляд:

$$\psi_{i,k,\dots,l}^B(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \hat{S} \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \dots \varphi_l(\vec{r}_N). \quad (86.9)$$

Відмітимо, що оператор антисиметризації $\hat{A}$ чи оператор симетризації $\hat{S}$ послідовно враховує принцип нерозпізнаності квантових частинок одного сорту. Покажемо тепер, що із антисиметризації хвильових функцій для ферміонів відразу слідує принцип Паулі: *тобто два ферміони не можуть перебувати в одному квантовому стані*.

Доведення: проведемо від супротивного, тобто нехай два ферміони перебувають в одному квантовому стані, наприклад, i -му. Тоді їх хвильова функція

$$\psi_{ii}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_1) \equiv 0. \quad (86.10)$$

Ми отримали рівність тотожно рівну 0, за означенням такого стану не існує.

Отже, немає двох ферміонів, які б могли перебувати в одному квантовому стані.

§87. Числа заповнень

Як ми уже вияснили, що хвильова функція системи тотожних частинок визначається співвідношенням:

$$\psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \left\{ \begin{matrix} \hat{A} \\ \hat{S} \end{matrix} \right\} \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_k(\vec{r}_2) \dots \varphi_l(\vec{r}_N), \quad (87.1)$$

причому $\hat{A}$ береться для ферміонів, а $\hat{S}$ - для бозонів.

При такому виборі хвильових функцій немає змісту вказувати, яка частика перебуває в якому квантовому стані. Має тільки зміст говорити про розподіл частинок за одночастинковими станами. Оскільки в хвильовій функції після дії оператора $\hat{S}$ або $\hat{A}$ будуть самі різні можливі комбінації. Тому мікростан квантового ідеального газу (а також і його хвильова функція) будуть задані, якщо ми вкажемо скільки частинок буде перебувати в кожному одночастинковому стані. Позначимо через n_k - число частинок, які в даний момент часу перебувають в одночастинковому стані з хвильовою функцією φ_k і енергією $\mathcal{E}_k$.

Розглянемо сукупність величин

$$n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, \quad (87.2)$$

які задані для певного моменту часу.

Числа $n_1, n_2, \dots, n_k, \dots$ називаються *числами заповнень одночастинкових станів*, а сукупність величин (87.2) вказує скільки

частинок перебуває в кожному одночастинковому стані з хвильовими функціями

$$\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k, \dots \quad (87.3)$$

Іншими словами, сукупність величин (87.2) задана для деякого моменту часу та визначає одночастинкові стани всіх частинок, а отже, і мікростан всієї системи.

Числа заповнень для бозонів можуть приймати будь-які значення, а для ферміонів тільки 0 і 1. Внаслідок слабкої взаємодії між частинками ідеального газу, вони переходять з одних одночастинкових станів в інші, тобто сукупність величин (87.2) весь час змінюється так, що з часом змінюється мікростан системи.

В зв'язку з цим будемо номерувати всі можливі набори чисел заповнення додатковим індексом, наприклад, α . Тоді будемо писати, що наприклад, в мікростані α

$$n_1^\alpha, n_2^\alpha, \dots, n_k^\alpha, \dots \quad (87.4)$$

Очевидно, що числа заповнень задовольняють таким співвідношенням:

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha = N, \quad (87.5)$$

а енергія системи в мікростані α :

$$E_\alpha = n_1^\alpha \varepsilon_1 + n_2^\alpha \varepsilon_2 + \dots n_k^\alpha \varepsilon_k + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha \varepsilon_k. \quad (87.6)$$

Тому канонічний розподіл Гіббса для ідеального газу можна записати так:

$$W_\alpha = W_{n_1^\alpha, n_2^\alpha, \dots, n_k^\alpha \dots} = e^{\frac{F - E_\alpha}{\theta}} = e^{\frac{F - \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha \varepsilon_k}{\theta}} \quad (87.7)$$

при умові

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha = N. \quad (87.8)$$

Аналогічно до виразу (87.7) запишемо квантовий великий канонічний розподіл Гіббса:

$$W_\alpha = e^{\frac{\Omega + \mu N - E_\alpha}{\theta}}, \quad (87.9)$$

де індекс α вказує набір чисел заповнення (87.4) і отже, фіксує число частинок системи.

Очевидно, що число частинок в мікростані α задається співвідношенням (87.10)

$$N_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha. \quad (87.10)$$

Тому після підстановки виразів (87.6) і (87.10) у вираз (87.9), отримуємо:

$$W_\alpha = W_{n_1^\alpha, n_2^\alpha, \dots, n_k^\alpha \dots} = e^{\frac{\Omega + \mu N_\alpha - E_\alpha}{\theta}} = e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^{\infty} \mu n_k^\alpha - \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha \varepsilon_k}{\theta}} = e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_k) n_k^\alpha}{\theta}}. \quad (87.11)$$

Вираз (87.11) задає нам ймовірність мікростану системи, який визначається числом заповнення $n_1^\alpha, n_2^\alpha, \dots, n_k^\alpha, \dots$ або задає ймовірність мікростану системи, який характеризується числом частинок N_α і енергією E_α і певними числами заповнень.

Зауваження: великий канонічний розподіл не фіксує число частинок і в зв'язку з цим сума у виразі (87.10) може приймати довільні значення від $[0; \infty]$.

Лекція 26. КВАНТОВІ РОЗПОДІЛИ

§88. Функція розподілу за мікростанами для ферміонів і бозонів.

§89. Аналіз розподілів Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.

§90. Розподіл Гіббса в напівпровідниках.

§91. Порівняння квантових і класичного розподілів.

[1. §7.1, §7.3, §7.6-§7.8; 2. §5.1, §5.8, §5.9; 3. §17, §18; 5. §7.1, §7.4; 6. §70-§73; 7. §39, §40]

§88. Функція розподілу за мікростанами для ферміонів і бозонів

Ми вияснили, що числа заповнень n_k^α змінюються від мікростану в зв'язку слабкою взаємодією частинок. Зрозуміло, що розраховувати для мікроскопічної системи $n_k = n_k(t)$ практично неможливо, тому дуже важливою характеристикою квантового ідеального газу є середнє число частинок в кожному мікростані або середнє значення чисел заповнення $\bar{n}_k$, яке показує, скільки в середньому знаходиться частинок в кожному одночастинковому стані для системи, що перебуває в стані термодинамічної рівноваги. Це середнє значення $\bar{n}_k$ називається *функцією розподілу частинок за*

одночастинковим станам. Обчислимо цю функцію розподілу для квантового ідеального газу. За означенням середнього

$$\bar{n}_k = \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha W_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha e^{\frac{F - \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha \varepsilon_k}{\theta}}, \quad (88.1)$$

де α - виражає мікростан.

Сумування в формулі (88.1) проводиться за всім можливим набором чисел заповнення, тобто за всіма можливими мікростанами, а отже, за всіма α . Причому сумування у формулі (88.1) ведеться за тим набором чисел заповнення, що задовольняють умові:

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha = N. \quad (88.2)$$

Очевидно, що суму у виразі (88.1) можна переписати в такому вигляді:

$$\sum_{\alpha} n_k^\alpha e^{\frac{F - \sum_{k=1}^{\infty} n_k^\alpha \varepsilon_k}{\theta}} = \sum_{n_1, n_2, \dots} n_k e^{\frac{F - \sum_{k=1}^{\infty} n_k \varepsilon_k}{\theta}}, \quad (88.3)$$

де

α	n_1	n_2	n_3	n_4	n_5
I	3	0	0	0	0
II	0	3	0	0	0
III	0	0			

Причому в рівності (88.3) треба взяти ті члени, які задовольняють умові:

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k = N. \quad (88.4)$$

Обчислити суму у виразі (88.3) за умови (88.4) досить важко і тому скористуємось великим канонічним розподілом, в якому додаткова умова (88.4) відсутня

$$\bar{n}_k = \sum_{n_1, n_2, \dots} n_k e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}. \quad (88.5)$$

Сума у виразі (88.5) береться без будь-яких обмежень, оскільки число частинок у великому канонічному розподілі може бути довільним. Виділимо далі у виразі (88.5) суму по n_k :

$$\bar{n}_k = \sum_{n_k} n_k \sum_{n_1, n_2} e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}} =$$

$$= \sum_{n_k} n_k e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}} \sum'_{n_1, n_2} e^{\frac{\Omega + \sum_{i=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_i) n_i}{\theta}}, \quad (88.6)$$

де $\sum'_{n_1, n_2}$ – відсутнє сумування по n_k .

Для того, щоб пояснити (88.6) запишемо умову нормування великого канонічного розподілу:

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} e^{\frac{\Omega + \sum_{k=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}} = 1. \quad (88.7)$$

В сумі виразу (88.7) проведемо теж сумування по n_k :

$$\sum_{n_k} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}} \sum'_{n_1, n_2} e^{\frac{\Omega + \sum_{i=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_i) n_i}{\theta}} = 1. \quad (88.8)$$

Звідси

$$\sum'_{n_1, n_2} e^{\frac{\Omega + \sum_{i=1}^{\infty} (\mu - \varepsilon_i) n_i}{\theta}} = \frac{1}{\sum_{n_k} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}}. \quad (88.9)$$

Підставимо вираз (88.9) у співвідношення (88.6), в результаті отримаємо:

$$\bar{n}_k = \frac{\sum_{n_k} n_k e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}}{\sum_{n_k} e^{\frac{(\mu - \varepsilon_k) n_k}{\theta}}}. \quad (88.10)$$

Введемо позначення

$$\xi_k = \frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}. \quad (88.11)$$

Тоді

$$\bar{n}_k = \frac{\sum_{n_k} n_k e^{\xi_k n_k}}{\sum_{n_k} e^{\xi_k n_k}}. \quad (88.12)$$

Всі розрахунки, які виконувались до цих пір були справедливі як для ферміонів так і для бозонів. Наступні обчислення для ферміонів і бозонів проведемо окремо.

1. Ферміони.

Для ферміонів $n_k = 0; 1$. Тоді сума у виразі (88.12) для ферміонів запишеться в такому вигляді:

$$\bar{n}_k^\Phi = \frac{\sum_{n_k=0}^1 n_k e^{\xi_k n_k}}{\sum_{n_k=0}^1 e^{\xi_k n_k}} = \frac{0 \cdot e^{0 \cdot \xi_k} + 1 \cdot e^{1 \cdot \xi_k}}{e^{\xi_k \cdot 0} + e^{\xi_k \cdot 1}} = \frac{e^{\xi_k}}{1 + e^{\xi_k}} = \frac{1}{e^{-\xi_k} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{\xi_k - \mu}{\theta}} + 1} \quad (88.13)$$

або

$$\bar{n}_k^\Phi = \frac{1}{e^{\frac{\xi_k - \mu}{\theta}} + 1}. \quad (88.14)$$

Вираз (88.14) дає нам функцію розподілу для ферміонів і називається *функцією розподілу Фермі-Дірака*.

2. Бозони

Для бозонів $n_k^B = 0; 1; 2; \dots$. Тоді вираз для бозонів можемо записати:

$$\bar{n}_k^B = \frac{\sum_{n_k=0}^{\infty} n_k e^{\xi_k n_k}}{\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{\xi_k n_k}} = \frac{S_2}{S_1}. \quad (88.15)$$

Розрахуємо окремо суми, що входять у вираз (88.15)

$$S_1 = \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{\xi_k n_k} = 1 + e^{\xi_k} + e^{2\xi_k} + e^{3\xi_k} + \dots = \frac{1}{1 - e^{\xi_k}}. \quad (88.16)$$

Обрахуємо тепер суму S_2

$$S_2 = \sum_{n_k=0}^{\infty} n_k e^{\xi_k n_k} = \frac{\partial S_1}{\partial \xi_k} = \frac{(-1)}{(1 - e^{\xi_k})} (-e^{\xi_k}) = \frac{e^{\xi_k}}{(1 - e^{\xi_k})^2}. \quad (88.17)$$

Співвідношення (88.17), (88.16) підставимо у співвідношення (88.15)

$$\bar{n}_k^B = \frac{S_2}{S_1} = \frac{e^{\xi_k}(1 - e^{\xi_k})}{(1 - e^{\xi_k})^2} = \frac{e^{\xi_k}}{1 - e^{\xi_k}} = \frac{1}{e^{\xi_k} - 1} = \frac{1}{e^{\frac{\xi_k - \mu}{\theta}} - 1} \quad (88.18)$$

або

$$\bar{n}_k^B = \frac{1}{e^{\frac{\xi_k - \mu}{\theta}} - 1}. \quad (88.19)$$

Вираз (88.19) представляє собою функцію розподілу для бозонів і називається *розподілом Бозе-Ейнштейна*.

Зауваження: розподіл Бозе-Ейнштейна справедливий за умови, коли $e^{\xi_k} < 1$, де e^{ξ_k} - це множник геометричної прогресії.

Отже, величина

$$\xi_k = \frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta} < 0. \quad (88.20)$$

Якщо умова співвідношення (88.20) не виконується, то

відповідно суми у виразі (88.15) розбігаються.

§89. Аналіз розподілів Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна

Ми вияснили, що для ферміонів функція розподілу має такий вигляд:

$$\bar{n}_k^F = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} + 1}. \quad (89.1)$$

Для бозонів:

$$\bar{n}_k^B = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} - 1}. \quad (89.2)$$

У випадку класичних частинок функція розподілу мала вигляд:

$$\bar{n}_k = e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}. \quad (89.3)$$

Перш ніж встановити в яких випадках можна користуватися класичним розподілом, а в яких квантовим, розглянемо квантовий розподіл (властивості) Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.

Видно, що квантовий розподіл (89.1) і (89.2) можна записати в загальному вигляді:

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} \pm 1}. \quad (89.4)$$

За означенням вираз (89.4) дає середнє число частинок ідеального газу в одночастинковому стані, якому відповідає енергія ε_k (у випадку коли системи перебувають в стані термодинамічної рівноваги). Дане означення враховує той факт, що енергетичний рівень ε_k може бути вироджений з кратністю (g_k). Тобто енергетичному рівню ε_k відповідає g_k одночастинкових станів, то в цьому випадку квантовий розподіл дає середнє число частинок в будь-якому з цих одночастинкових станів. Очевидно, що в кожному з цих станів перебуває однакове число частинок.

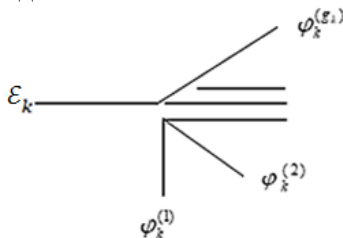


Рис. 71

Як бачимо, що коли кратність виродження $g_k = 1$, то тоді одночастинковому енергетичному рівню відповідає один одночастинковий стан, отже, розподіли (89.4) будуть давати одночасно середнє число частинок з енергією $\mathcal{E}_k$ (рис. 71).

Знайдемо тепер в загальному випадку середнє число частинок $\bar{n}(\mathcal{E}_k)$, які мають енергію $\mathcal{E}_k$, тобто треба знайти в середньому скільки частинок перебуває на енергетичному рівні $\mathcal{E}_k$. Очевидно, що для цього треба підрахувати скільки частинок перебуває в кожному одночастинковому стані і отримані результати просумувати або записати

$$\bar{n}(\mathcal{E}_k) = \bar{n}_k g_k. \quad (89.5)$$

Видно, що якщо $g_k = 1$, то $\bar{n}_k(\mathcal{E}_k) = \bar{n}_k$. Очевидно має місце таке співвідношення, що середнє число частинок в системі дорівнює:

$$\bar{N} = \sum_{\substack{\text{за всіма} \\ \text{мікростанами}}} \bar{n}_k = \sum_{\mathcal{E}_k=0}^{\infty} \bar{n}_k g_k. \quad (89.6)$$

Запишемо вираз (89.6) у явному вигляді:

$$\bar{N} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{g_k}{e^{\frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\theta}} \pm 1}. \quad (89.7)$$

Відмітимо, що вираз (89.7) служить для розрахунку хімічного потенціалу квантового ідеального газу. Хоча на практиці хімічний потенціал розраховувати важко, оскільки формула (89.7) представляє собою деяке трансцендентне рівняння. Все сказане вище було справедливе для бозонів і ферміонів. Подальший розгляд властивостей їх проведемо окремо.

1. Ферміони.

Оскільки у виразі (89.1) (розподіл Фермі-Дірака) експонента $e^{\frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\theta}} \geq 0$, тоді

$$0 \leq \bar{n}_k^{\Phi} \leq 1. \quad (89.8)$$

Очевидно, що вираз (89.8) - це наслідок принципу Паулі. Як бачимо також, що $\bar{n}_k^{\Phi}$ пропорційний ймовірності того, що даний одночастинковий стан зайнятий. Оскільки до того ж $\bar{n}_k^{\Phi}$ співпадає з ймовірністю того, що даний одночастинковий стан з енергією $\mathcal{E}_k$ зайнятий. Таким чином, відносно змісту розподілу Фермі-Дірака можна сказати так:

1. Розподіл Фермі-Дірака дає середнє число ферміонів в одночастинковому стані з енергією $\mathcal{E}_k$.

2. Розподіл Фермі-Дірака дає ймовірність того, що даний одночастинковий стан з енергією $\mathcal{E}_k$ зайнятий.

Розглянемо тепер енергетичну шкалу. Будемо відкладати на ній енергетичні рівні частинок ферміонного ідеального газу. З квантової механіки відомо, що віддаль між енергетичними рівнями $\Delta\mathcal{E}_k \sim \frac{1}{V}$ обернено пропорційна об'єму, в якому рухаються частинки. Тому, якщо газ займає макроскопічний об'єм, то віддалі між рівнями будуть дуже малими і енергетичні рівні будуть розташовані дуже густо (рис 72).

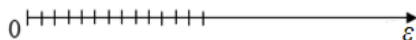


Рис. 72

Ми вияснили, що на енергетичному рівні з енергією $\mathcal{E}_k$ може перебувати g_k -ферміонів (а в одночастинковому - не більше одного ферміона).

Зрозуміло, що енергетичні рівні спочатку будуть заповнюватись до відказу починаючи з найнижчих і тільки самий верхній рівень може бути заповнений неповністю.

Розглянемо заповнення енергетичних рівнів:

а) нехай $T = 0$, в цьому випадку зрозуміло, що будуть заповнені всі рівні $\mathcal{E}_k = 0$, $\mathcal{E}_k = \mathcal{E}_{\max}$, а всі вищі рівні будуть вільними. У цьому випадку на кожному енергетичному рівні, крім можливо останнього буде g_k -ферміонів.

Означення. Енергетичний рівень, який відповідає максимальній енергії ферміона (для $T = 0$) називається *рівнем Фермі*.

Отже, для $T = 0$ рівень Фермі співпадає з максимальною енергією ферміона. Зобразимо тепер для цього випадку розподіл Фермі-Дірака (рис. 73).

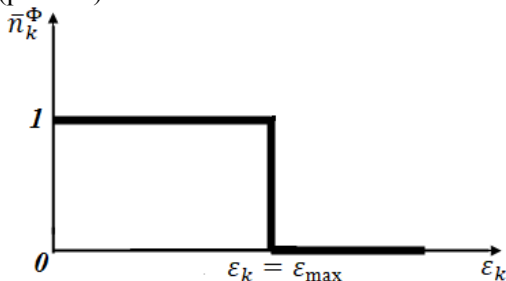


Рис. 73

Покажемо, що такий вигляд функції розподілу слідує безпосередньо з формули (89.1) із розподілу Фермі-Дірака. Дійсно, якщо у формулі (89.1) $T \rightarrow 0$, а $\varepsilon_k < \mu$, то в цьому випадку $\bar{n}_k^\Phi = 1$. Якщо $\varepsilon_k > \mu$, тоді $\bar{n}_k^\Phi = 0$. Звісно слідує висновок, що для $T = 0$, енергетичний рівень $\varepsilon_k = \mu$ розділяє повністю заняті стани одночастинкових станів. Очевидно, що для $T = 0$ рівень Фермі співпадає з хімічним потенціалом системи

$$\mu = \varepsilon_F \quad (89.9)$$

або хімічний потенціал дорівнює максимальній енергії ферміона для $T = 0$.

б) $T \neq 0$. Зрозуміло, що в цьому випадку можливі переходи ферміонів тільки поблизу тих енергетичних рівнів, що лежать в околі рівня Фермі. У цьому випадку частинки будуть переходити з нижчих енергетичних рівнів поблизу рівня Фермі на вищі. Так, що в цьому випадку функція розподілу буде змінюватись тільки в області поблизу рівня Фермі, там де енергія $\varepsilon_k \sim \varepsilon_F$.

Та область енергій де $\bar{n}_k$ змінюється від 1 до 0 називається *областю розмиття фермійвського розподілу*. Очевидно, що область розмиття порядку кількох kT (рис. 74). Ясно, що по мірі збільшення температури область розмиття буде зростати. І коли температура kT стане порядку ε_F , то весь розподіл буде розмитий, тобто $kT \sim \varepsilon_F$.

Покажемо, що всі ці висновки сліднують з розподілу Фермі-Дірака (89.1). Якщо $T \neq 0$, а $\varepsilon_k \ll \mu$, то в цьому випадку $\bar{n}_k^\Phi \rightarrow 1$. І якщо $\varepsilon_k \gg \mu$, то $\bar{n}_k^\Phi \rightarrow 0$. У вузькій області де $\varepsilon_k \approx \mu$ функція розподілу буде плавно переходити від 1 до 0.

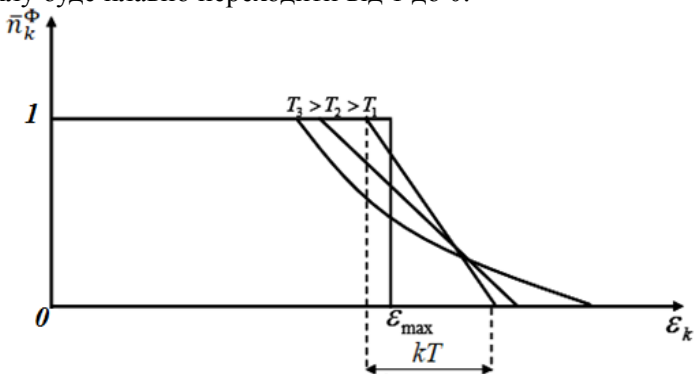


Рис. 74

Означення. Якщо $T \neq 0$, то той енергетичний рівень

ймовірність заповнення станів якого дорівнює $\frac{1}{2}$ називається *рівнем Фермі*. Дійсно, якщо $\varepsilon_k = \mu$, то

$$\bar{n}_k^F = \frac{1}{e^0 + 1} = \frac{1}{2}.$$

Видно, що для $T \neq 0$ рівень Фермі співпадає з хімічним потенціалом. З ростом температури рівень Фермі зміщується в область менших енергій.

Зауваження: розподіл статистичної фізики, який займається вивченням ферміонів, що описується функцією розподілу (89.1) називається *статистикою Фермі-Дірака*.

2. Бозони.

Як слідує з самого виводу, функція розподілу для бозонів справедлива тільки тоді, коли

$$\xi_k = \frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta} < 0. \quad (89.10)$$

Оскільки співвідношення (89.10) справедливе для будь-яких енергій, в тому числі для енергій $\varepsilon_k = 0$, то очевидно, що для бозонів $\mu < 0$. (89.11)

Таким чином, в стані термодинамічної рівноваги хімічний потенціал бозонів від'ємний. Якщо співвідношення (89.11) не виконується, то відповідні суми розбігаються - $\bar{n}_k^B \rightarrow \infty$. Це означає, що для додатного хімічного потенціалу в системі бозонів не може встановитися стан термодинамічної рівноваги.

Розглянемо деякі властивості, які не входять в спільні властивості ферміонів і бозонів.

1. $0 \leq \bar{n}_k^B \leq \infty$, тобто тут відсутній принцип Паулі.
2. Побудуємо графік функції розподілу Бозе-Ейнштейна (рис. 75).

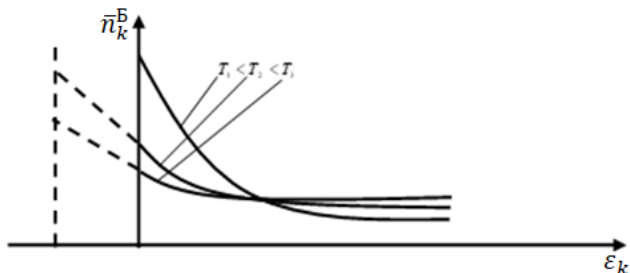


Рис. 75

Ми вияснили, що хімічний потенціал ферміонів має фізичний зміст. Для бозонів $\mu < 0$, тому хімічний потенціал немає конкретного фізичного змісту.

§90. Розподіл Гіббса в напівпровідниках

Розглянемо розподіл Гіббса із змінним числом частинок. Розглянемо ізольовану систему, яка має велике число частинок $N_0 = \text{const}$ і має внутрішню енергію $E_0 = \text{const}$. Виділимо в середині цієї системи малу частину і частину, обмежену об'ємом («тіло»), що знаходиться в термодинамічній рівновазі з останньою частиною системи («середовищем»). Середовище і тіло можуть обмінюватися частинками і змінювати тоді свої енергії. Позначимо число частинок, що перейшли в тіло, через j , а зміну енергії тіла в певному квантовому стані через $E_m^{(j)}$. За такого підходу енергія стане рівною $(E_0 - E_m^{(j)})$, а число частинок в ній стане рівним $(N_0 - j)$ і тоді ентропія середовища зміниться на деяку величину $\Delta S_m^{(j)}$. Тоді ймовірність $W_m^{(j)}$ того, що в тілі буде j частинок, а тіло буде в такому квантовому стані, що

$$W_m^{(j)} = A e^{\frac{\Delta S_m^{(j)}}{k}}, \quad (90.1)$$

де A - нормуючий множник.

Величина $\Delta S_m^{(j)}$ зв'язана з іншими термодинамічними величинами. Так розглянемо систему в термодинамічній рівновазі і врахуємо, що температура скрізь (в тілі, і в середовищі) однакова, маємо, що зміна вільної енергії середовища

$$\Delta F_m^{(j)} = -E_m^{(j)} - T \Delta S_m^{(j)}. \quad (90.2)$$

Так як вільна енергія за незмінних значень змінних визначає стан, є адитивна величина, то вільна енергія обчислена на одну частинку:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial j} \right)_{V, T = \text{const}} = F. \quad (90.3)$$

Тоді у виразі (90.2) маємо: $\Delta F_m^{(j)} = -jF$, і тоді зміна ентропії середовища дорівнює:

$$\Delta S_m^{(j)} = \frac{jF - E_m^{(j)}}{T}.$$

Після підстановки вираз (90.1) прийме вигляд:

$$W_m^{(j)} = A e^{\frac{jF - E_m^{(j)}}{T}}. \quad (90.4)$$

Це співвідношення виражає розподіл Гіббса із змінним числом частинок.

Примінімо розподіл Гіббса до випадку багатозарядних центрів. Тоді під тілом слідує розуміти центр, а під середовищем - кристал. $W_m^{(j)}$ буде давати ймовірність того, що на центрі є j електронів, причому енергія центру дорівнює $E_m^{(j)}$.

Сталу A визначають із умови нормування

$$\sum_{j=0}^M \sum_m W_m^{(j)} = 1, \quad (90.5)$$

де сумуємо по m враховуючи всі збуджені стани центру; M - максимальне число електронів, яке може захвачувати центр.

Це дає

$$\frac{1}{A} = \sum_{j=0}^M \sum_m e^{\frac{jF - E_m^{(j)}}{T}}. \quad (90.6)$$

Результат виразів (90.4) і (90.6) виразимо у вигляді зручному для подальшого застосування, тобто

$$E_m^{(j)} = E^{(j)} + E_{jm} \quad (m = 1, 2, \dots), \quad (90.7)$$

де $E^{(j)}$ - енергія центра з j елементів в основному стані, а E_{jm} - енергія m -го збудженого стану, що відноситься до основного стану. Виражає ймовірність $W^{(j)}$ значення центру з j елементами в довільно вибраному стані

$$W^{(j)} = \sum_m W_m^{(j)}.$$

Означення. Виродження в квантовій системі - існування різних станів квантової системи, в яких деяка фізична величина A приймає одне значення, оператор $\hat{A}$ відповідної такої величини, що зумовлене сукупністю лінійних незалежних власних функцій ψ_a^k :

$$\hat{A}\psi_a^k = a\psi_a^k,$$

де $k = 1, 2, \dots, k$.

Число k - кратність виразу власного значення, а воно може бути кінетичним, нескінченним і прямувати до k . Може приймати дискретний або неперервний ряд значень.

Для розрізнення збудженого стану введемо кратність

виродження β_{jm} (цілі числа)

$$W^{(j)} = \frac{g_i e^{\frac{jF - E^{(j)}}{kT}}}{\sum_{j=0}^m g_i e^{\frac{jF - E^{(j)}}{kT}}}, \quad (90.8)$$

де через g_i позначається $\frac{\sum j_m}{kT}$.

Тобто

$$g_i \beta_i + \sum_{m=2,3,\dots} \beta_{im} e^{\frac{\sum j_m}{kT}}. \quad (90.9)$$

В цих виразах β_i - кратність виродження від стану центра з j елементами, а g_j - узагальнене кратності виродження j -го зарядженого стану.

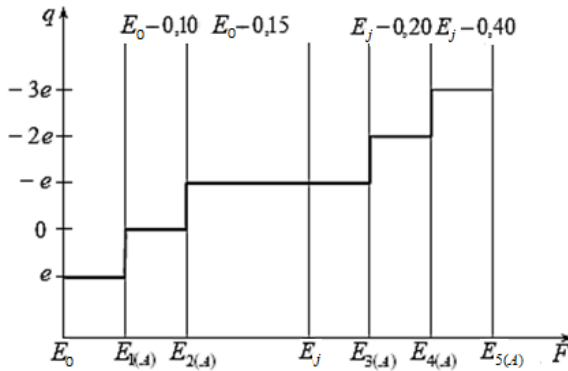


Рис. 76

Так як за змістом $E^{(j)}$ - перетворення енергії центра, то в (90.8) слідє приймати $E^{(0)} = 0$. Енергія $E^{(j)}$, входить в розподіл Гіббса (90.8) зв'язаного рівнями E_j енергії діаграми (рис. 76). Так як рівні енергії центру під час приєднання до нього одного електрона

$$E^{(j)} = \sum_{j=1}^j E_j. \quad (90.10)$$

У цьому випадку рівень відліку енергій тут будь-який, якщо тільки E_j і F відрахувати від одного початкового рівня, тобто як початковий рівень із виразу

$$(jF - E^{(j)}).$$

Рівень Фермі, знаходиться із термодинамічних змінних і

визначається із співвідношення:

$$F = \left(\frac{\partial F}{\partial j} \right)_{V, T = \text{const}} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial j} \right)_{P, T = \text{const}}. \quad (90.11)$$

За наявності зовнішнього поля рівень F визначається із виразу (90.6) або із виразу (90.11), повинен мати і потенціальну енергію електрона в цьому полі $e\varphi$. За цією причиною його і називають *електрохімічним потенціалом*.

Якщо домовитись відраховувати F від границі зони провідності E_k для $\varphi = 0$, то електрохімічний потенціал електрона в виразі (90.12)

$$F = \zeta - e\varphi, \quad (90.12)$$

де $\zeta = F - F_e$ - хімічний потенціал в полі з потенціалом.

Розглянемо простий допоміжний центр, що має один невироджений рівень енергії без збудженого стану тоді у виразі (90.8) j може приймати тільки два значення: 0 і 1. Тоді ймовірність центру з елементами дорівнює:

$$W = \frac{e^{\frac{F-E_1}{kT}}}{1 + e^{\frac{F-E_1}{kT}}} = (1 + e^{\frac{E_1-F}{kT}})^{-1}. \quad (90.13)$$

Таким чином, розподіл Гіббса для невироджених енергій рівня переходить в формулу Фермі-Дірака

$$f(E, t) = \left(1 + e^{\frac{E-F}{kT}} \right)^{-1}. \quad (90.14)$$

За високих температур $e^{-\frac{\mu}{kT}} = e^{-\frac{F}{kT}} \gg 1$, квантовий ефект станів не існує.

Враховуючи вираз (90.13) видно, що введений Фермі - рівень є не що інше як вільна енергія, розрахована на один електрон. Із виразів (90.8) і (90.10) слідує, що

$$\frac{j^{(j)}}{j^{(j-1)}} = \frac{N_j}{N_{j-n}} = \frac{g_j}{g_{j-1}} e^{\frac{F-E_j}{kT}}. \quad (90.15)$$

§91. Порівняння квантових і класичного розподілів

Знаючи деякі властивості ферміонів та бозонів розглянемо за яких умов ідеальний газ можна описувати класичною функцією розподілу (91.3) або квантових розподілів (91.1), (91.2)

$$\bar{n}_k^\Phi = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} + 1}, \quad (91.1)$$

$$\bar{n}_k^B = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} - 1}, \quad (91.2)$$

$$\bar{n}_k = e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}}. \quad (91.3)$$

Порівнюючи вирази (91.1), (91.2) із виразом (91.3) легко помітити, що квантовий розподіл (91.1), (91.2) переходить в класичний розподіл (91.3) за умови

$$e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\theta}} \gg 1. \quad (91.4)$$

Прийmemo таку термінологію, якщо ідеальний газ описується розподілами (91.1) і (91.2), то він називається *виродженим* (тобто квантовим), якщо ж класичним розподілом (91.3), то газ будемо називати *невиродженим*.

Поняття виродження газу і виродження рівня зовсім інші речі. Дослідимо тепер умову виразу (91.4). Оскільки співвідношення (91.4) справедливе для всіх енергій включаючи енергію $\varepsilon_k = 0$, то його можна записати у вигляді

$$e^{-\frac{\mu}{\theta}} \gg 1, \quad (91.5)$$

де μ - це хімічний потенціал класичного ідеального газу.

Але за умови співвідношення (91.5) як ми покажемо на практичних заняттях:

$$e^{\frac{\mu}{\theta}} = \left(\frac{h^2}{2\pi m \theta} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{N}{V}. \quad (91.6)$$

З врахуванням виразу (91.6) умова (91.5) набуває вигляду:

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m \theta}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \gg 1. \quad (91.7)$$

Очевидно, що умова виразу (91.7), це умова неvirодженості, тобто класичності ідеального газу. Очевидно, що коли має місце

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m \theta}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \leq 1, \quad (91.8)$$

то газ називається *виродженим* або *квантовим*. Якщо виконується умова:

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m \theta}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \ll 1, \quad (91.9)$$

то ідеальний газ називається *сильно виродженим*, тобто *сильно*

квантовим.

Розглянемо тепер умову невинродженості ідеального газу у виразі (91.7) і пояснимо її. Видно, що невинродженість ідеального газу сприяють такі умови:

1. Великі маси частинок m .
2. Висока температура T .
3. Мала концентрація частинок $\frac{N}{V}$.

Проаналізуємо ці умови детально.

1. Для великих мас частинок довжина хвилі де Бройля мікрочастинки $\lambda = \frac{h}{mv}$ буде прямувати до нуля, тобто частинка втрачає хвильові властивості і все в більшій мірі буде проявляти властивості чисто корпускулярні. Крім того, віддаль між енергетичними рівнями частинок

$$\Delta E_{12} \sim \frac{1}{m}.$$

Отже, під час зростання маси частинок віддаль між рівнями буде ставати все меншою й меншою і енергетичний спектр частинки буде перетворюватись із дискретного на неперервний, тобто за зростання маси мікрочастинки вона буде втрачати чисто квантові особливості, а саме, дискретність енергетичного спектру.

2. Для низьких температур розподіли Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна різко відрізняються один від одного, що є наслідком принципу Паулі для ферміонів і відсутність такого обмеження для бозонів. Крім того для бозонів за низьких температур проявляється ефект надтекучості бозонного газу. Суть якого полягає в тому, що для температур $T < T_{\text{кр}}$ практично всі бозони осідають на найнижчому енергетичному рівні і тоді між ними проявляються сили взаємного притягання, що мають суто квантову природу.

Під час зростання температури (розподіл Фермі) область розмиття ферміонівського розподілу починає розширюватись, а в бозонному газі зникають вище згадані квантові ефекти. Для достатньо високої температури ферміони втрачають свою квантову властивість, що зв'язано з принципом Паулі і можуть переміщуватись між будь якими енергетичними рівнями. Тоді їхній розподіл за енергетичними рівнями мало буде відрізнятися від розподілу Бозе-Ейнштейна. Крім того, за високих температур середні швидкості молекул будуть досить великими і отже, довжина хвилі де Бройля $\lambda = \frac{h}{mv}$ буде досить малою

та під час зростання температури буде прямувати до нуля. Отже, тоді частинка буде втрачати хвильові властивості. Поведінка частинки буде тоді все в більшій мірі схожа на поведінку класичного куліскульярного об'єкта.

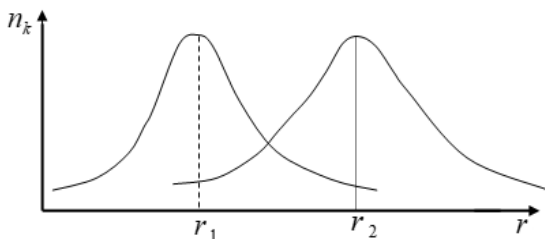


Рис. 77

3. Для великих концентрацій хвильові функції сусідніх частинок будуть перекриватись. Отже, між ними буде проявлятися чисто квантовий ефект обмінної взаємодії (рис. 77).

У випадку бозонів цей ефект приводить до надтекучості бозонного газу. Явище осідання бозонів на найнижчий енергетичний рівень називається *Бозе-концепцією*. Газ, в якому відбулася Бозе-конденсація проявляється властивість надтекучості.

Якщо бозонний газ - це газ заряджених бозонів, то явище надтекучості зарядженого бозонного газу приводить до явища надпровідності. Таким чином, *явище надпровідності* - це явище надтекучості в газі куперовських пар двох спарених електронів. У випадку ферміонів обмінна взаємодія приводить до появи принципу Паулі, що різко відрізняють ферміони від бозонів і від класичних частинок. За зменшення концентрації вказані вище квантові ефекти, стають все менш і менш помітними, так що частинки все в більшій мірі будуть проявляти класичні властивості. Введемо тепер так звану температуру виродження, яку визначають з умови:

$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m k T_B}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 1. \quad (91.10)$$

Звідси температура виродження

$$T_B = \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{h^2}{2\pi m k}. \quad (91.11)$$

При цьому, якщо температура системи $T \gg T_B$ - газ буде невиродженим або інакше кажучи класичним. А для $T \leq T_B$ - газ буде виродженим - квантовим. І коли $T \ll T_B$ - газ сильно вироджений, сильно квантовий.

Як бачимо, температура виродження визначається масою і концентрацією частинок. З виразу (91.11) видно, що $\hbar \rightarrow 0$, то $T_B \rightarrow 0$ і для будь-яких температур буде виконуватись співвідношення $T \gg T_B$, газ можна вважати класичним. Це означає, що температура виродження чисто квантова величина, яка в класичній фізиці дорівнює нулю.

Оцінимо тепер температуру виродження для різних випадків.

1. Розглянемо звичайний газ, наприклад, водень і знайдемо для нього температуру виродження. Відомо, що за нормальних умов в 1 см^3 газу є 10^{19} молекул. Відповідно концентрація та маса водню будуть:

$$n = 10^{19} \text{ см}^{-3} = 10^{25} \text{ м}^{-3},$$

$$m_{\text{H}_2} \approx 10^{-27} \text{ кг}.$$

Тоді температура виродження

$$T_B \approx (10^{25})^{\frac{2}{3}} \frac{10^{-68} \cdot 36}{6,28 \cdot 10^{-27} \cdot 1,388 \cdot 10^{-23}} = (10^{25})^{\frac{2}{3}} \cdot 10^{-19} =$$

$$= 36 \cdot 10^{\frac{2}{3}} \cdot 10^{16} \cdot 10^{-19} \approx 5 \cdot 10^{-1} \text{ К}.$$

Висновок. За таких температур можна водень вважати таким, що $T \gg T_B$, тобто для всіх реальних температур водень й інші реальні гази можна вважати класичними. Тому зрозуміло, чому вивчаючи теорію газів ми користуємось класичними розподілами Максвелла, Максвелла-Больцмана і Больцмана. До речі єдиною необхідною умовою реалізації розподілу Максвелла та інших є класичність системи. Отже, для звичайних газів ця умова завжди виконується.

Лекція 27. ПОВЕДІНКА ВИРОДЖЕНИХ ГАЗІВ ТА РІВНОВАЖНЕ ЕЛЕКТРОМАГНІТНЕ ВИПРОМІНЮВАННЯ

§92. Електронний газ в металі.

§93. Рівноважне випромінювання як ідеальний газ фотонів.

[1. §7.6-§7.8; 2. §5.2, §5.3, §5.11; 3. §17, §18; 5. §7.2, §7.3; 6. §74, §75; 7. §34, §41]

§92. Електронний газ в металі

Розглянемо електрони в металі. Вони взаємодіють між собою з

іонами кристалічної ґратки, тому всі електрони металу неможна вважати ідеальним газом. Але виявляється із цих усіх електронів можна виділити так звану групу електронів провідності, які між собою практично не взаємодіють.

Оцінимо тепер температуру виродження для сукупності таких електронів, які будемо називати *електронним газом* або *газом електронів провідності*. Для таких газів концентрація буде:

$$n = 10^{22} \text{см}^{-3} = 10^{28} \text{м}^{-3},$$

$$T_{\text{в}} \approx (10^{28})^{\frac{2}{3}} \frac{10^{-68} \cdot 36}{6,28 \cdot 10^{-30} \cdot 1,388 \cdot 10^{-23}} = 10^{\frac{2}{3}} \cdot 10^{-16} \cdot 10^{18} \cdot 36 \approx 2 \cdot 10^4 \text{ К}.$$

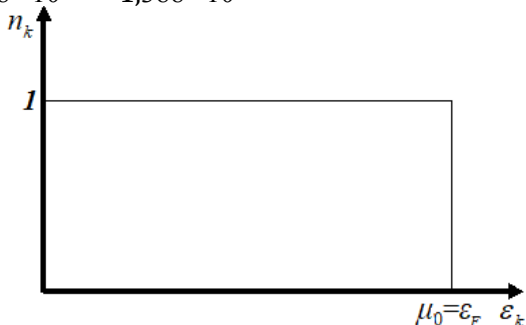


Рис. 78.

Висновок. Практично для всіх реальних температур аж до температури плавлення металів електронний газ провідності задовольняє умові $T \ll T_{\text{в}}$ і отже, є сильно виродженим. Таким чином, практично для всіх температур газ електронів провідності металів описується функцією розподілу Фермі-Дірака, майже такою як для температури $T = 0$, область розмиття для електронів провідності незначна. Стан електронного газу для $T = 0$ називається *основним станом*, а електронний газ - *цілком виродженим*. Для $T \rightarrow 0$ розподіл Фермі-Дірака переходить у «сходінку» Фермі (рис. 78). Тут - хімічний потенціал електронів для $T = 0$, він називається *енергією Фермі*: $\mu_0 = \varepsilon_F$.

Саме завдяки цій властивості (електронного газу) як ми покажемо пізніше електронний газ в металі практично не вносить вкладу в теплоємність. А теплоємність металу буде зумовлена тим вкладом, який дають в неї атоми кристалічної ґратки.

§93. Рівноважне випромінювання як ідеальний газ

фотонів

Застосуємо результати квантової статистики до вивчення рівноважного випромінювання, яке займає об'єм V і перебуває в рівновазі з стінками для температури T (в динамічній рівновазі). Класична статистика проводила дослідження в області високих частот, що привело до ультрафіолетової катастрофи.

Закон Релея-Джинса для опису випромінювання абсолютно чорного тіла виводиться із закону рівнорозподілу та класичних уявлень про електромагнітне поле як нескінченновимірну динамічну систему. Він добре узгоджується з експериментальними даними на малих частотах (для довгих інфрачервоних хвиль), однак уже на ділянці видимого світла помітні розбіжності, а в ультрафіолетовому діапазоні розбіжності стають просто разючими (що й дало назву парадоксу). Оскільки закон не узгоджувався зі спостереженнями, наприкінці XIX століття виникали труднощі під час опису фотометричних характеристик фізичних тіл. Більше того, закон передбачав невинне зростання інтенсивності випромінювання зі збільшенням частоти, а повна потужність такого випромінювання мала бути нескінченною.

В цьому параграфі ми покажемо, що квантова статистична фізика розв'язує всі труднощі класичної теорії і дає результати, що співпадають з експериментом. В силу корпускулярно-хвильового дуалізму, електромагнітне випромінювання можна розглядати як газ частинок - фотонів. Кожен з фотонів можна характеризувати енергією:

$$\mathcal{E} = \hbar\omega \quad (93.1)$$

і імпульсом:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (93.2)$$

де k - хвильовий вектор, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

В записі виразів (93.1) і (93.2) вже присутній корпускулярно-хвильовий дуалізм. В правій, величини, що виражають хвилю, а корпускулярні властивості в лівій. Так як спин фотонів цілий, то газ фотонів є бозонним газом. В силу ж лінійності рівнянь Максвелла, яким задовольняє сильне електромагнітне поле, фотони можна розглядати як ідеальний газ (бозонів) фотонів. Отже, для ідеального газу фотонів функція розподілу буде представляти розподіл Бозе-Ейнштейна

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{\theta}} - 1}, \quad (93.3)$$

де i - це індекс, що визначає мікростан фотона.

Мікростан фотона ми будемо задавати:

- 1) хвильовим вектором $\vec{k}$;
- 2) енергією ε , або частотою ω ;
- 3) поляризацією j .

Отже, $i \equiv \vec{k}, \omega, j$. Фотони, можуть випромінюватись і поглинатись стінками. В стані термодинамічної рівноваги встановлюється таке число фотонів, яке задовольняє умові рівноваги системи. Оскільки ми розглядаємо систему для сталих об'єму V і температури T , то умовою рівноваги є мінімум вільної енергії. Таким чином, умова мінімуму має вигляд:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T} = 0. \quad (93.4)$$

Але похідна

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T} = \mu. \quad (93.5)$$

Отже, в рівновазі хімічний потенціал фотонів дорівнює нулю

$$\mu = 0. \quad (93.6)$$

Таким чином, приходимо до висновку, що хімічний потенціал в системі, число частинок якої залежить від температури і не є сталим дорівнює нулю.

Отже, розподіл Бозе-Ейнштейна для фотонів, який дає середнє число фотонів в одночастинковому стані буде записуватись у вигляді:

$$\bar{n}_{\vec{k},j} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega kj}{\theta}} - 1}. \quad (93.7)$$

Знайдемо енергію рівноважного випромінювання $dU(\omega)$, яка припадає на частотний інтервал $[\omega, \omega + d\omega]$. Ця енергія дорівнює:

$$dU(\omega) = dn(\omega)\hbar\omega. \quad (93.8)$$

де $dn(\omega)$ - це число фотонів всіх можливих поляризацій, частота яких лежить в інтервалі $[\omega, \omega + d\omega]$.

Число фотонів $dn(\omega)$ дорівнює добутку числа квантових станів фотона в інтервалі частот $[\omega, \omega + d\omega]$ - $dN(\omega)$ на середнє число $(\bar{n}_{\vec{k},j})$ фотонів в одному квантовому стані

$$dn(\omega) = dN(\omega)\bar{n}_{\vec{k},j}. \quad (93.9)$$

Якщо знайти квантовий стан фотона в інтервалі $[\omega, \omega + d\omega]$ і підставити отримане значення в рівняння (93.9), а потім в рівняння (93.8), то знайдемо енергію рівноважного випромінювання. Тоді об'ємна густина рівноважного випромінювання (формула Планка) може бути знайдена за співвідношенням:

$$U_0(\omega) = \frac{1}{V} \frac{dU(\omega)}{d\omega}. \quad (93.10)$$

Обчислимо тепер всі розглянуті вище величини, тобто обчислимо число квантових станів в інтервалі частот $(\omega, \omega + d\omega)$. Для цього будемо розглядати фотони як частинки і характеризувати їх координатами та імпульсами в μ -просторі. Тоді елементові об'єму $d\gamma$ μ -простору відповідає $2 \frac{d\gamma}{\hbar^3}$ квантових станів фотона. Двійка враховує дві поляризації фотона

$$d\gamma = dxdydzdp_xdp_ydp_z. \quad (93.11)$$

Знайдемо тепер число квантових станів фотона для яких імпульс лежить в межах від $[p, p + dp]$ (або частота лежить в межах $[\omega, \omega + d\omega]$). Оскільки імпульс зв'язаний з частотою співвідношенням:

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (93.12)$$

Для цього виділимо в μ -просторі область для якої імпульс (модуль) лежить у вказаних межах (рис. 79).

Позначимо цю область G_p (рис. 80), тоді

$$\begin{aligned} dN(\omega) &= 2 \int_{G_p} \frac{d\gamma}{\hbar^3} = \frac{2}{\hbar^3} \iiint_V dxdydz \iiint_{G_p} dp_x dp_y dp_z = \frac{2}{\hbar^3} V 4\pi p^2 dp = \\ &= \frac{8V\pi}{\hbar^3} \left(\frac{\hbar}{c}\right)^3 \omega^2 d\omega = \frac{8V\pi\hbar^3}{\hbar^3 c^3 8\pi^3} \omega^2 d\omega = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega. \end{aligned} \quad (93.13)$$

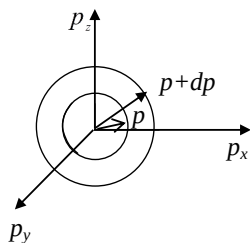


Рис. 79

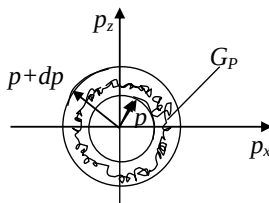


Рис. 80

Таким чином, число квантових станів дорівнює:

$$dN(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega. \quad (93.14)$$

Знайдемо тепер число фотонів $dn(\omega)$, частота яких лежить в межах $[\omega, \omega + d\omega]$

$$dn(\omega) = \bar{n}_{\vec{k},j} dN(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1}. \quad (93.15)$$

Знайдемо тепер енергію рівноважного випромінювання $dU(\omega)$

$$dU(\omega) = \hbar\omega dn(\omega) = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1}. \quad (93.16)$$

Знайдемо тепер спектральну густину випромінювання $U_0(\omega)$, що задається формулою (93.10), яка дає енергію випромінювання в одиниці об'єму в одиничному частотному інтервалі. Отже,

$$U_0(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1}. \quad (93.17)$$

Вираз (93.17) представляє формулу Планка, яка була виведена в грудні 1899 року і знаменувала собою початок квантової механіки. Вираз (93.17) був перевірений експериментально і отримані результати співпадали в усьому інтервалі частот.

Розглянемо тепер граничні випадки формули (93.17).

1. Малі частоти:

$$\frac{\hbar\omega}{\theta} \ll 1.$$

В цьому випадку експоненту в знаменнику можна розкласти в ряд:

$$U_0(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{1 + \frac{\hbar\omega}{\theta} - 1} = \frac{\theta\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (93.18)$$

Вираз (93.18) співпадає з формулою Релея-Джинса, яка була отримана в класичній статистичній фізиці.

2. Високі частоти:

$$\frac{\hbar\omega}{\theta} \gg 1.$$

В цьому випадку одиницею в знаменнику можна знехтувати і в результаті отримаємо:

$$U_0(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}. \quad (93.19)$$

Вираз (93.19) співпадає з відомою формулою Віна. Зобразимо

тепер отримані результати графічно (рис. 81).

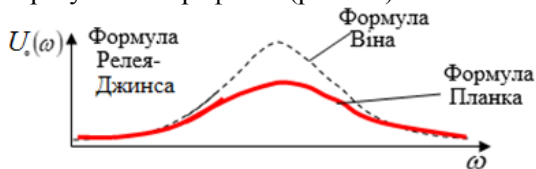


Рис. 81

Зауваження: формула Віна може бути легко отримана з уявлень про класичний газ фотона, а саме:

$$dU(\omega) = dn(\omega)\hbar\omega = dN(\omega)\bar{n}_k(\omega)\hbar\omega,$$

а

$$\bar{n}_k(\omega) = e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\theta}} = e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}.$$

Зауваження: під час користування тільки формулою Релея-Джинса, отримується результат, який називається *ультрафіолетовою катастрофою*. Тобто із зростанням частоти спектральна густина випромінювання необмежено зростає.

Розглянемо тепер деякі наслідки формули Планка.

1. Закон зміщення Віна.

Знайдемо частоту, яка відповідає максимуму функції Планка. Для цього продиференціюємо вираз (93.17) за частотою

$$U_0(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left\{ \frac{3\omega^2}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} - \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}}{(e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1)^2} + \left(\frac{\hbar}{\theta}\right)\omega^3 \right\} = 0, \quad (93.20)$$

$$3 - \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} \frac{\hbar\omega}{\theta} = 0. \quad (93.21)$$

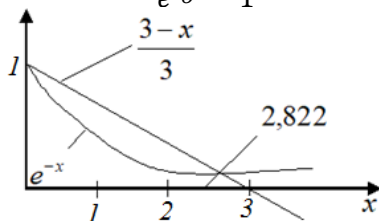


Рис. 82

Вираз (93.21) - трансцендентне рівняння, яке можна розв'язати графічно або на машині (рис. 82), тобто

$$\frac{\hbar\omega}{\theta} = x, \quad (93.22)$$

$$3 - \frac{x}{1 - e^{-x}} = 0,$$

$$3 - 3e^{-x} - x = 0,$$

$$\frac{3 - x}{3} = e^{-x}, \quad (93.23)$$

$$x_{\max} = \frac{\hbar\omega_{\max}}{\theta} = 2,822,$$

$$\omega_{\max} = \frac{2,822}{\hbar} kT$$

або

$$\omega_{\max} \sim T.$$

Тобто з ростом температури максимум розподілу Планка зсувається в область більших частот (рис. 83).

2. Знайдемо повну густину випромінювання, тобто енергію випромінювання в одиниці об'єму в усьому інтервалі частот. Для цього проінтегруємо формулу Планка в усьому частотному інтервалі

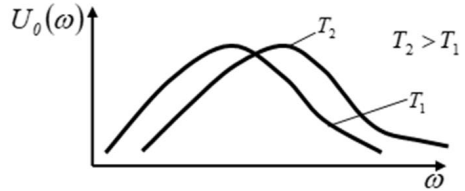


Рис. 83

$$U_0 = \int_0^{\infty} U_0(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}. \quad (93.24)$$

Введемо позначення

$$\frac{\hbar\omega}{\theta} = x \Rightarrow \omega = \frac{\theta}{\hbar} x.$$

Тоді

$$U_0 = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left(\frac{\theta}{\hbar}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (93.25)$$

де

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Таким чином,

$$U_0 = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{k^4 \pi^4}{15} T^4 = \frac{\pi^2 k^4}{\hbar^3 c^3 15} T^4 = \sigma T^4. \quad (93.26)$$

Отже, густина рівноважного випромінювання пропорційна четвертій степені температури (закон Стефана-Больцмана). Закон Стефана-Больцмана дає величину

$$I(T) = \left(\frac{U_0}{V} \right) c = \frac{\pi^2 k^4}{\hbar^3 c^2 15} T^4. \quad (93.27)$$

Висновок. Таким чином, формула Планка повністю розв'язує всі труднощі класичної теорії.

Лекція 28. ОСНОВИ ТЕОРІЇ ФЛУКТУАЦІЙ

§94. Поняття про флуктуації.

§95. Принцип Больцмана. Розподіл Гаусса.

§96. Флуктуації адитивних величин для макроскопічних систем.

§97. Флуктуації основних термодинамічних величин.

[1. §8.1-§8.4; 2. §7.1-§7.4; 3. §24, §27; 5. §8.1; 6. §76-§78; 7. §30-§33]

§94. Поняття про флуктуації

Флуктуаціями ми будемо називати відхилення фізичної величини від їх середніх значень. Ці відхилення зв'язані з тим, що будь-яка величина, яка характеризує систему залежить від мікростану системи, а отже, і визначається рухом і взаємодією частинок, з яких складається ця система. Оскільки тепловий рух частинок - це хаотичний, безладний рух, то й значення фізичної величини, що описує дану систему буде з часом змінюватись. Причому ця зміна буде носити теж хаотичний характер, навіть, коли система перебуває в рівноважному стані. Щоб оцінити величину флуктуації знайдемо параметри, якими будемо вимірювати ці флуктуації. Знайдемо відхилення енергії від її середнього значення

$$\begin{aligned}\Delta \bar{\varepsilon} &= \varepsilon - \bar{\varepsilon} = \int_0^{\infty} (\varepsilon - \bar{\varepsilon}) \frac{1}{Z} e^{-\frac{\varepsilon}{\theta}} \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{\theta}} \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= \varepsilon \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon}{\theta}} \Omega(\varepsilon) d\varepsilon = \bar{\varepsilon} \cdot \varepsilon = 0.\end{aligned}\quad (94.1)$$

Отже, $\Delta \bar{\varepsilon}$ не годиться для розрахунку флуктуацій. Для розрахунку флуктуацій скористаємося виразом:

$$(\Delta \bar{\varepsilon})^2 = \overline{(\varepsilon - \bar{\varepsilon})^2} = \overline{\varepsilon^2 - 2\varepsilon\bar{\varepsilon} + (\bar{\varepsilon})^2} = (\overline{\varepsilon^2}) - (\bar{\varepsilon})^2. \quad (94.2)$$

Таким чином, для оцінки флуктуацій ми будемо користуватися середньоквадратичним відхиленням.

§95. Принцип Больцмана. Розподіл Гаусса

Нехай a - це фізична величина, яка описує систему в стані термодинамічної рівноваги. Такому її значенню нехай відповідає значення ентропії системи $S(a)$, $a \Rightarrow S(a)$. Тоді можна показати, що ймовірність того, що значення фізичної величини a буде лежати в межах $[a, a + da]$ виражається таким співвідношенням:

$$\omega(a)da = C e^{\frac{S(a)}{k}} da. \quad (95.1)$$

Результат у виразі (95.1) носить назву *принципу Больцмана*.

Константа C у формулі (95.1) знаходиться з умови нормування:

$$\int \omega(a)da = C \int e^{\frac{S(a)}{k}} da = 1. \quad (95.2)$$

Якщо відрахувати величину $\langle a \rangle$ від її рівноважного значення, тобто вважати, в стані термодинамічної рівноваги $a = 0$ і врахувати те, що для флуктуацій значення $\langle a \rangle$ мале, то тоді $S(a)$ можна розкласти в ряд поблизу рівноважного значення $a = 0$

$$S(a) = S(0) + \left. \frac{\partial S}{\partial a} \right|_{a=0} a + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial a^2} \right|_{a=0} a^2 + \dots \quad (95.3)$$

Так як в стані термодинамічної рівноваги, коли $a = 0$, ентропія приймає максимальне значення, то

$$\left. \frac{\partial S}{\partial a} \right|_{a=0} = 0.$$

Отже,

$$S(a) = S(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial a^2} \Big|_{a=0} a^2. \quad (95.4)$$

Підставимо вираз (95.4) у вираз (95.1)

$$\omega(a)da = C_1 e^{-\sigma a^2} da, \quad (95.5)$$

де

$$\sigma = -\frac{1}{2k} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial a^2} \right)_{a=0} > 0. \quad (95.6)$$

Таким чином, з виразу (95.5) видно, що для ймовірності відхилення величини (a) від її рівноважного значення ми отримали розподіл Гауса $(e^{-\sigma a^2})$ (рис. 84).

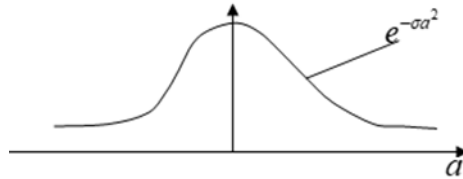


Рис. 84

Константу C_1 у формулі (95.5) визначимо з умови нормування:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \omega(a)da = C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma a^2} da = C_1 \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} = 1. \quad (95.7)$$

З виразу (95.7), отримаємо значення

$$C_1 = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}}. \quad (95.8)$$

Оцінимо тепер середньоквадратичну флуктуацію:

$$\begin{aligned} \bar{a}^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 \omega(a)da = C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 e^{-\sigma a^2} da = C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sigma a^2} da = \\ &= C_1 \left(-\frac{\partial}{\partial \sigma} \right) \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{(2\sqrt{\sigma})^{3/2}} = \frac{1}{2\sigma}. \end{aligned} \quad (95.9)$$

Під час відшукування інтегралу у виразі (95.9) скористалися умовою:

$$\omega(A)dA \sim e^{-BA^2} dA.$$

Зауваження: у всіх інтегралів виразу (95.9) ми розширили границі інтегрування від $-\infty$ до $+\infty$, користувалися тим, що під інтегралом є швидко спадна підінтегральна функція.

Тобто, якщо є кілька термодинамічних величин $a_1, a_2, \dots, a_n$, то ймовірність того, що значення цих величин буде лежати в межах $[a_1, a_1 + da_1], [a_2, a_2 + da_2], \dots, [a_n, a_n + da_n]$ буде виражатись принципом Больцмана

$$\omega(a_1, a_2, \dots, a_n) da_1 da_2 \dots da_n = C e^{\frac{1}{k} \int a_1, a_2, \dots, a_n} da_1 da_2 \dots da_n. \quad (95.10)$$

Ця формула представляє собою вираз для ймовірності $\omega(a_1, a_2, \dots, a_n)$ знаходження системи частинок у певному стані, де $a_1, a_2, \dots, a_n$ - координати частинок у просторі станів, а $da_1 da_2 \dots da_n$ - елементи об'єму в цьому просторі станів.

Отже, формула (95.10) визначає ймовірність знаходження системи частинок у конкретному стані, враховуючи розподіл енергій між різними станами за принципом Больцмана. В статистичній фізиці даний принцип стверджує, що в будь-якій системі, яка знаходиться у рівновазі за певної температури, ймовірність знаходження частинок у певних станах залежить від їх енергії та кількості енергетичних рівнів.

Принцип Больцмана широко використовується в фізиці та інших галузях науки для пояснення та прогнозування різноманітних фізичних явищ.

§96. Флуктуації адитивних величин для макроскопічних систем

Доведемо те, що флуктуація будь-якої адитивної величини, що описує макроскопічну систему, є надзвичайно малою, і ці адитивні величини є практично весь час постійними (як і енергія).

Розглянемо довільну макроскопічну систему. Нехай $f = f(q, p)$ - адитивна фізична величина, яка описує цю систему, $\bar{f}$ - середнє значення цієї величини. Доведемо, що відносна флуктуація (або дисперсія) цієї величини, тобто

$$\sigma_B(f) = \frac{\sqrt{(f - \bar{f})^2}}{\bar{f}} \quad (96.1)$$

є дуже малою.

Розіб'ємо дану макроскопічну систему на $n \geq 1$ малих, але макроскопічних підсистем. Нехай f_i - значення фізичної величини f в i -тій підсистемі. Тоді, за означенням адитивності, можна записати, що

$$f = \sum_{i=1}^n f_i. \quad (96.2)$$

Усереднимо цей вираз і згідно формули $\overline{A_1(q,p) + A_2(q,p)} = \overline{A_1(q,p)} + \overline{A_2(q,p)}$ отримаємо:

$$\bar{f} = \sum_{i=1}^n \bar{f}_i. \quad (96.3)$$

Введемо позначення $\Delta f_i = f_i - \bar{f}_i$ - відхилення фізичної величини f_i від свого середнього значення $\bar{f}_i$ в i -тій підсистемі. Тоді для відхилення фізичної величини $\bar{f}$ від її середнього значення для всієї системи маємо:

$$\Delta f = f - \bar{f} = \sum_{i=1}^n f_i - \sum_{i=1}^n \bar{f}_i = \sum_{i=1}^n \Delta f_i. \quad (96.4)$$

Піднесемо до квадрату:

$$(f - \bar{f})^2 = \left(\sum_{i=1}^n \Delta f_i \right)^2 = \sum_{i=1}^n (\Delta f_i)^2 + \sum_{i \neq k} \Delta f_i \cdot \Delta f_k. \quad (96.5)$$

У відповідності з формулою (96.1) знайдемо усереднене значення відхилення:

$$\overline{(f - \bar{f})^2} = \sum_{i=1}^n \overline{(\Delta f_i)^2} + \sum_{i \neq k} \overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k}. \quad (96.6)$$

Покажемо, що $\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = 0$. Оскільки кожна з підсистем є макроскопічною, то ці підсистеми є статистично незалежними. Отже, згідно з теоремою про множення ймовірностей, функція розподілу для всієї системи може бути записана у вигляді

$$\rho = \rho_1 \cdot \rho_2 \cdot \rho_3 \cdot \dots \cdot \rho_n, \quad (96.7)$$

де ρ_i - функція розподілу i -тої підсистеми.

Тоді для статистично незалежних підсистем буде виконуватися співвідношення:

$$\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = \overline{\Delta f_i} \cdot \overline{\Delta f_k}. \quad (96.8)$$

Це співвідношення можна довести, користуючись означенням статистичного середнього:

$$\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = \int \Delta f_i \cdot \Delta f_k \cdot \rho \cdot d\Gamma. \quad (96.9)$$

Підставимо в цей інтеграл функцію розподілу (96.7) і врахуємо, що

$d\Gamma = d\Gamma_1 \cdot d\Gamma_2 \cdot \dots \cdot d\Gamma_n$, де $d\Gamma_i$ - елементарний фазовий об'єм i -тої підсистеми. В результаті отримаємо:

$$\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = \int \rho_1 d\Gamma_1 \cdot \int \rho_2 d\Gamma_2 \cdot \dots \cdot \int \rho_n d\Gamma_n \cdot \int \Delta f_i \rho_i d\Gamma_i \cdot \int \Delta f_k \rho_k d\Gamma_k. \quad (96.10)$$

Функції розподілу ρ_i всіх підсистем є нормованими

$$\int \rho_i d\Gamma_i = 1, \quad (96.11)$$

тому (96.10) можна переписати у вигляді:

$$\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = \overline{\Delta f_i} \cdot \overline{\Delta f_k}. \quad (96.12)$$

Оскільки, за означенням

$$\int \Delta f_i \rho_i d\Gamma_i = \overline{\Delta f_i}. \quad (96.13)$$

Зазначимо, що це співвідношення справедливе для випадку, коли фізичні величини f_i та $\bar{f}_i$ описують статистично незалежні підсистеми.

Знайдемо тепер середнє відхилення:

$$\overline{\Delta f_i} = f_i - \bar{f}_i = \bar{f}_i - \bar{f}_i = 0. \quad (96.14)$$

А це означає, що дійсно виконується співвідношення

$$\overline{\Delta f_i \cdot \Delta f_k} = 0. \quad (96.15)$$

Тоді формула (96.6) може бути записана у вигляді:

$$\overline{(f - \bar{f})^2} = \sum_{i=1}^n \overline{(\Delta f_i)^2}. \quad (96.16)$$

Підставимо формулу (96.16) та (96.3) у вираз (96.1). В результаті отримаємо:

$$\sigma_B(f) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \overline{(\Delta f_i)^2}}}{\sum_{i=1}^n \bar{f}_i}. \quad (96.17)$$

Будемо далі для простоти вважати, що всі підсистеми приблизно однакові за розмірами і містять приблизно однакове число частинок. Тоді середнє значення фізичної величини f для всіх підсистем буде приблизно однаковим: $\bar{f}_i \approx f_0$. Тобто, можна записати

$$\sum_{i=1}^n \bar{f}_i \approx n f_0. \quad (96.18)$$

З цієї ж причини $\overline{(\Delta f_i)^2} \approx \overline{(\Delta f_0)^2}$, тоді

$$\sum_{i=1}^n (\Delta f_i)^2 \approx n \cdot (\Delta f_0)^2. \quad (96.19)$$

Якщо цей вираз підставити у формулу (96.17), то отримаємо

$$\sigma_B(f) \approx \frac{\sqrt{n \cdot (\Delta f_0)^2}}{n \cdot \bar{f}_0} \sim \frac{1}{\sqrt{n}}. \quad (96.20)$$

З іншого боку, число n підсистем, на які можна розбити систему, буде тим більшим, чим більшою буде система і чим більше число частинок N вона буде містити. Тобто, можна вважати, що $n \sim N$. Тоді формула (96.20) набуде вигляду:

$$\sigma_B(f) \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (96.21)$$

Таким чином, ми довели, що відносна дисперсія довільної адитивної величини пропорційна $\frac{1}{\sqrt{N}}$ і для макроскопічної системи є надзвичайно малою. Якщо позначити абсолютне значення середнього відхилення через $|\Delta f|$, тобто

$$|\Delta f| = |f - \bar{f}| \approx \sqrt{(f - \bar{f})^2}, \quad (96.22)$$

то отримаємо:

$$\frac{|\Delta f|}{\bar{f}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (96.23)$$

Тобто відносну дисперсію (відхилення) для будь-якої фізичної величини можна подати ще й у такому вигляді:

$$\sigma_B(f) = \frac{\sqrt{(f - \bar{f})^2}}{\bar{f}} \sim \frac{|\Delta f|}{\bar{f}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (96.24)$$

Як приклад, вираз для розрахунку відносної дисперсії за енергією можна записати:

$$\sigma_B(E) = \frac{\sqrt{(E - \bar{E})^2}}{\bar{E}} \sim \frac{|\Delta E|}{\bar{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (96.25)$$

Це означає, що всі адитивні фізичні величини, які описують макроскопічну систему, з величезною точністю залишаються постійними і рівними своїм середнім значенням і зазнають зовсім незначних флуктуацій відносно цих середніх значень. Інакше кажучи,

для макроскопічних систем адитивні величини з величезною точністю рівні своїм середнім значенням. На основі цього можна зробити важливий висновок: *не дивлячись на те, що в статфізиці використовуються статистичні (ймовірнісні) закономірності, висновки статистичної фізики для макроскопічних систем є практично достовірними.*

На основі сказаного вище можна дати таке статистичне означення стану термодинамічної рівноваги: макроскопічний стан системи, в якому адитивні фізичні величини співпадають зі своїми середніми значеннями, називається *станом термодинамічної рівноваги.*

Якщо система, перебуваючи в деякому мікростані, з макроскопічної точки зору вони знаходиться в стані термодинамічної рівноваги, то це означає, що даний мікростан реалізує стан термодинамічної рівноваги.

Всі мікростани системи, для яких значення адитивних фізичних величин співпадають зі своїми середніми значеннями, називаються *рівноважними мікростанами* або *мікростанами, які реалізують стан термодинамічної рівноваги.*

Мікростани, в яких значення адитивних фізичних величин не рівні своїм середнім значенням, називаються *нерівноважними мікростанами*, і вони реалізують нерівноважний макроскопічний стан системи. Зазначимо, що *кожному макростану системи відповідає величезне число мікростанів, які його реалізують.*

Зроблений нами висновок про те, що в стані термодинамічної рівноваги адитивні фізичні величини співпадають зі своїми середніми значеннями, означає, що тоді фазова точка системи практично весь час знаходиться в рівноважних мікростанах. Оскільки завжди є незначні флуктуації фізичних величин, то в такі моменти часу фазова точка системи попадає в мікростани, які реалізують значення фізичних величин, що відрізняються (хоча і дуже мало) від своїх середніх значень. І чим більшою є флуктуація тим рідше вона реалізується. Тому фазова точка системи порівняно рідко попадає в мікростани, які реалізують значення фізичних величин, що суттєво відрізняються від середніх значень.

§97. Флуктуації основних термодинамічних величин

Виходячи з принципу Больцмана та розподілу Гауса для флуктуацій виведемо формулу, що дає можливість розрахувати

флуктуації різних термодинамічних величин. Як видно, з §94 ймовірність флуктуацій пропорційна

$$e^{\frac{S(a)}{k}},$$

де $S(a)$ - повне значення ентропії, яке для значення параметру дорівнює a .

Так як і для флуктуацій змінна величина ентропії та величина самого параметра, то можна записати, що ймовірність флуктуації

$$a \sim e^{\frac{\Delta S}{k}},$$

причому ΔS - зміна ентропії для флуктуації, тобто

$$\omega \sim e^{\frac{\Delta S}{k}}. \quad (97.1)$$

Якщо скористатися для виразу ентропії ΔS , то для ймовірності флуктуації величини (a) можна отримати такий вираз:

$$\omega(a)da = Ce^{\frac{\Delta P \Delta V - \Delta T \Delta S}{2kT}} da, \quad (97.2)$$

де під T - треба розуміти температуру термостата.

Вираз (97.2) дуже зручний для обчислення флуктуацій основних термодинамічних величин.

1. Розрахуємо флуктуацію об'єму і температури, тобто розглянемо випадок, коли параметри (a) рівні величинам ΔV і ΔT . Для цього у виразі (97.2) виразимо ΔP і ΔS через ΔV і ΔT . Скористаємось тим, що

$$P = P(V, T) \text{ і } S = S(V, T),$$

$$\Delta P = \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \Delta T, \quad (97.3)$$

$$\Delta S = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \Delta T = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \Delta V + \frac{1}{T} C_V \Delta T. \quad (97.4)$$

Скористаємось у виразі (97.4) тим, що

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V;$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V;$$

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T;$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V};$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = -\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T}.$$

Підставивши вирази (97.3) і (97.4) у вираз (97.2) і скоротивши члени пропорційні добутку ΔV і ΔT , отримаємо такий результат:

$$\omega(\Delta V, \Delta T) = C e^{\left\{ \frac{1}{2kT} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 - \frac{C_V}{2kT^2} (\Delta T)^2 \right\}} = C e^{\left\{ \frac{1}{2kT} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T (\Delta V)^2 \right\}} e^{\left\{ -\frac{C}{2kT} (\Delta T)^2 \right\}}. \quad (97.5)$$

З виразу (97.5) слідує, що флуктуації об'єму та температури статистично незалежні, тому що ймовірність дорівнює добутку ймовірностей, і вони розподілені за законом Гауса. З порівняння формули (95.9) з §95 слідує:

$$(\overline{\Delta V})^2 = -kT \underbrace{\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T}_{\text{коефіцієнт стисливості}} = -kT \chi_T, \quad (97.6)$$

де χ_T - коефіцієнт стисливості.

Відповідно

$$(\Delta \bar{T})^2 = \frac{kT^2}{C_V}. \quad (97.7)$$

А в силу статистичної незалежності:

$$\overline{\Delta V \Delta T} = 0. \quad (97.8)$$

2. Виберемо за незалежні змінні V і T та обчислимо флуктуацію енергії ΔE використовуючи результати попереднього пункту. Оскільки $E = E(V, T)$, то

$$\partial E = \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \Delta T = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] \Delta V + C_V \Delta T, \quad (97.9)$$

$$\begin{aligned} dS &= \frac{dU + PdV}{T} = \frac{dU + P \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T dP}{T} = \frac{\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right) dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + PdV}{T} = \\ &= \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right) + P \right] dV + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT. \end{aligned} \quad (97.10)$$

Якщо тепер в співвідношенні (97.10) виразити $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)$ через $\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)$ і підставити в формулу (97.9), то отримаємо вираз:

$$\left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] \Delta V + C_V \Delta T.$$

Піднесемо вираз (96.9) до квадрату і усереднимо:

$$(\overline{\Delta E})^2 = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right]^2 (\overline{\Delta V})^2 + C_V^2 (\overline{\Delta T})^2. \quad (97.11)$$

Підставимо тепер в співвідношення (97.11) $(\overline{\Delta V})^2$ і $(\overline{\Delta T})^2$. Вирази (97.6) і (97.7) підставимо у вираз (97.11)

$$(\overline{\Delta E})^2 = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right]^2 (-kT\chi_T) + C_V kT^2. \quad (97.12)$$

Якщо розглянемо ізохорний процес, коли об'єм системи сталий, то $\chi = 0$, тоді

$$(\overline{\Delta E})^2 = C_V kT^2 \quad (97.13).$$

Врахуємо тепер величину $(\overline{\Delta E})^2$ для одноатомного газу. Для атомного ідеального газу маємо:

$$U = \frac{3}{2} NkT; \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} Nk.$$

Тоді

$$(\overline{\Delta E})^2 = C_V kT^2 = \frac{3}{2} Nk^2 T^2. \quad (97.14)$$

Обчислимо тепер абсолютну величину

$$\xi = \sqrt{\frac{(\overline{\Delta E})^2}{\bar{E}}} = \frac{\sqrt{\frac{3}{2} N} kT}{\frac{3}{2} N kT} = \sqrt{\frac{2}{3N}}. \quad (97.15)$$

Якщо за формулою (97.14) обчислити величину середньоквадратичної дисперсії (відносної)

$$\sqrt{\overline{\Delta E^2}} = \sqrt{\frac{3}{2} NkT}, \quad (97.16)$$

то отримаємо значення

$$\sqrt{\overline{\Delta E^2}} = \sqrt{\frac{3}{2} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300} \approx 10^{12} \cdot 4 \cdot 10^{-21} \approx 4 \cdot 10^{-9} \text{ Дж}.$$

Висновок. З виразів (97.14), (97.15) і (97.16) видно, що величини (абсолютна і відносна) флуктуації енергії малі. З цих результатів роблять на перший погляд абсолютно правильний висновок, що флуктуації надзвичайно малі і не можуть впливати на макроскопічні властивості системи. Але з іншого боку теплоємність, яка є важливою макроскопічною величиною за формулою (97.13) сама пропорційна величині флуктуацій $C_V \sim (\overline{\Delta E})^2$.

Отже, якщо флуктуації з якихось причин збільшились в двое, то теплоємність теж зросте в двое. Тому тепер роль флуктуацій треба оцінити дещо по іншому ніж це ми приймали до цих пір. Правильне

формулювання флуктуацій таке: флуктуації в звичайних умовах настільки малі, що не можуть помітно змінити такі властивості системи як енергія, ентропія та інші, які з термодинамічної точки зору або самі є термодинамічними потенціалами, або являються їх першими похідними, наприклад, такі як ентропія.

Але разом з тим флуктуації визначають величини, які є другими похідними від термодинамічних потенціалів, наприклад, величини типу теплоємності.

З чисто фізичної точки зору - це значить, що флуктуації не визначають значення величин першого роду: енергія, ентропія, об'єм і так далі, визначають їх хід та характер зміни. Ріст флуктуації вказаний на значенні зміни даної величини для незначних змін параметра, що її визначає.

Лекція 29. ОСНОВИ КІНЕТИКИ НЕРІВНОВАЖНИХ ПРОЦЕСІВ

§98. Кінетичне рівняння Больцмана.

§99. Явища переносу.

§100. Основні положення термодинаміки нерівноважних систем.

[1. §9.1, §9.4, §9.7, §9.9, §9.10; 3. §26, §30, §31; 5. §9.1-§9.3; 6. §79-§81; 7. §53, §54]

§98. Кінетичне рівняння Больцмана

Розглянемо класичний ідеальний газ, що складається з N молекул масою m . Введемо для такого газу нерівноважну функцію розподілу

$$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z, t) \equiv f(\vec{r}, \vec{v}, t), \quad (98.1)$$

яка має такий фізичний зміст: величина

$$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z, t) dx dy dz dv_x dv_y dv_z \equiv f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v} \quad (98.2)$$

дає число молекул для яких в момент часу t координати центрів тяжіння молекул лежать в інтервалах $[x, x + dx]$, $[y, y + dy]$, $[z, z + dz]$ та їх швидкості в інтервалах

$$[v_x, v_x + dv_x], [v_y, v_y + dv_y], [v_z, v_z + dv_z]. \quad (98.3)$$

В шестимірному просторі координати і швидкості для цих молекул в кінці векторів $\vec{r}$ і $\vec{v}$ будуть лежати в околі точки з

координатами (98.3). Нехай на молекули діє сила $F(\vec{r}, t)$, тоді функція розподілу буде змінюватись і за час dt її зміну можна описати таким виразом:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t + dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} dt. \quad (98.4)$$

Цю зміну функції ми підрахуємо ще іншим способом. Знайшовши число молекул, які під дією зовнішньої сили змінили свої координати та імпульси за час dt . Прирівнявши ці зміни до виразу (98.4) ми знайдемо кінетичне рівняння Больцмана. Молекули проєкцій швидкості і координати лежать у вище сказаних межах ми будемо називати $(\vec{r}, \vec{v})$.

Розглянемо як за час dt змінюється кількість цих молекул.

Спочатку розглянемо зміну числа молекул тільки за рахунок зміни координати x і швидкості v_x . Тоді для простоти припустимо, що $v_x > 0$. Зобразимо в просторі той куб де буде лежати кінець радіуса-вектора $\vec{r}$ (рис. 85).

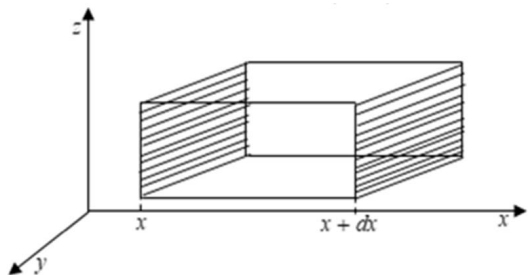


Рис. 85

За час dt радіус-вектор $\vec{r}$ змінюється на величину $\vec{v}dt$, а швидкість v на величину $\vec{v} = \left(\frac{\vec{F}}{m}\right) dt$.

1. а) Розглянемо зміну $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул, що тільки зв'язана із зміною їх координати. Для цього, спочатку розглянемо рух молекул вздовж осі x в припущенні, що $x > 0$. Тоді через ліву грань даного куба входить $f(x, y, z, \vec{v}, t) d\vec{v} dy dz \underbrace{v_x dt}_{dx}$ молекул, через ліву грань виходить

$f(x + dx, y, z, \vec{v}, t) d\vec{v} dy dz v_x dt$ молекул.

Отже, зміна числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул буде виражатися різницею числа молекул, які ввійшли і які вийшли з нього

$$\begin{aligned} f(x, y, z, \vec{v}, t) d\vec{v} dy dz v_x dt - f(x + dx, y, z, \vec{v}, t) d\vec{v} dy dz v_x dt = \\ = -\frac{\partial F}{\partial x} dx dy dz \vec{v} v_x dt = -\frac{\partial t}{\partial x} d\vec{r} d\vec{v} v_x dt. \end{aligned} \quad (98.5)$$

Проробивши аналогічну операцію для інших двох напрямків, можна знайти збільшення числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул в даному об'єкті за

рахунок руху через всі шість граней кубу. Це збільшення дорівнює:

$$-\left(v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z}\right) d\vec{r} d\vec{v} dt = -(\vec{v} \vec{\nabla}_r f) d\vec{r} d\vec{v} dt; \quad (98.6)$$

$$\vec{\nabla}_r f = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{k};$$

$$\vec{\nabla}_v f = \frac{\partial f}{\partial v_x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial v_y} \vec{j} + \frac{\partial f}{\partial v_z} \vec{k}.$$

б) Розглянемо тепер зміну числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул, що зв'язана із зміною їх швидкостей. Для цього необхідно розглянути рух молекул не в r -просторі як раніше, а у v -просторі. Тоді швидкість у v -просторі буде задаватись величиною:

$$\vec{v} = \vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}.$$

Отже, збільшення числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул зв'язане із збільшенням їх швидкості. Можна записати аналогічно до попереднього результату, в якому треба координати замінити на швидкості, а швидкість на прискорення $\vec{a}$. В результаті для збільшення числа молекул знаходимо:

$$\begin{aligned} -\left(a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} + a_y \frac{\partial f}{\partial v_y} + a_z \frac{\partial f}{\partial v_z}\right) d\vec{r} d\vec{v} dt &= -(\vec{a} \vec{\nabla}_v f) d\vec{r} d\vec{v} dt = \\ &= -\left(\frac{F}{m} \vec{\nabla}_v f\right) d\vec{r} d\vec{v} dt. \end{aligned} \quad (98.7)$$

Вирази (98.6) і (98.7) представляють собою зміну числа молекул пов'язаною із їх рухом (дрейфом) в $(\vec{r} \text{ і } \vec{v})$ просторі. Пізніше в кінетичному рівнянні Больцмана цю зміну функції розподілу будемо називати *дрейфовим членом*.

2. Розглянемо тепер зміну числа молекул пов'язаного із зіткненнями. Для простоти будемо розглядати тільки подвійні (бінарні) зіткнення нехтуючи потрійними елементами і так далі. Зіткнення молекул відбувається в одному елементі об'єму $d\vec{r}$, але одна з молекул буде належати об'єму $d\vec{v}$, а друга $d\vec{v}_1$. Очевидно, що число $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул, які вийшли з даного об'єму молекул повинне бути пропорційне $d\vec{r} d\vec{v} dt$, а їх число можна записати у вигляді - $b d\vec{r} d\vec{v} dt$. Причому коефіцієнт b пропорційний $f(d\vec{r} d\vec{v} dt)$, де b - коефіцієнт пропорційності, тобто $b \sim f(\vec{r}, \vec{v}, t)$.

Але разом з тим молекули, які мають іншу швидкість в результаті зіткнення можуть набути потрійну швидкість v . Тоді число $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул зросте на величину - $a d\vec{r} d\vec{v} dt$, де a - коефіцієнт

пропорційності $a \sim f(\vec{r}, \vec{v}, t)$.

Отже, повну зміну функції розподілу (98.4) (а отже, і зміну числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул) можна представити у вигляді суми дрейфового члена і члена, що пов'язаний із зіткненнями.

Останній вираз $(a - b)d\vec{r}d\vec{v}dt$ називається *членом зіткнення*.

Таким чином, для сумарної зміни числа $(\vec{r}, \vec{v})$ молекул, отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{r}d\vec{v}dt = & -(\vec{v}\vec{\nabla}_r f) d\vec{r}d\vec{v}dt - \\ & - \left(\frac{\vec{F}}{m} \vec{\nabla}_v f \right) d\vec{r}d\vec{v}dt + (a - b) d\vec{r}d\vec{v}dt. \end{aligned} \quad (98.8)$$

Перші два доданки в рівності (98.8), що стоять у правій частині - дрейфові члени, а третій - член зіткнень. Після скорочення на $d\vec{r}d\vec{v}dt$, рівняння (98.8) набуде вигляду:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{дрейф.}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{зіткн.}}; \quad (98.9)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{дрейф.}} = -(\vec{v}\vec{\nabla}_r f) - \left(\frac{\vec{F}}{m} \vec{\nabla}_v f \right), \quad (98.10)$$

а

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{зіткн.}} = a - b. \quad (98.11)$$

Для конкретного випадку можна привести розрахунок члена зіткнень з виразу (98.9), що представляє собою кінетичне рівняння Больцмана.

Розглянемо один із способів розв'язку рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації. Суть цього наближення полягає в тому, що зміну функції розподілу $\frac{\partial f}{\partial t}$ за час ∂t вважають рівною величині:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (98.12)$$

де f_0 - нерівноважна функція розподілу; f - рівноважна функція розподілу; τ - час релаксації.

Для того, щоб визначити фізичний зміст часу релаксації (τ), розв'яжемо диференціальне рівняння (98.12).

$$\int \frac{\partial f}{f - f_0} = -\int \frac{dt}{\tau}. \quad (98.13)$$

З виразу (98.13), отримуємо:

$$(f - f_0)_t = (f - f_0)_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (97.14)$$

Видно, що величина τ у виразі (98.14) дає той час за який відхилення функції f від f_0 зменшується в e раз порівняно з початковим відхиленням. Під час написання наближення часу релаксації вважалося, що проробляється така процедура. Зовнішня сила F виключається та визначається за такий час, за який нерівноважна функція розподілу перейде в рівноважну. З цим і пов'язана назва релаксація.

Якщо $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, то середні значення фізичної величини обчислюється за допомогою нерівноважної функції $f(\vec{r}, \vec{v})$, яка від часу не залежить. Такий стан системи називається *стаціонарним*. Прикладом нерівноважного, але стаціонарного стану може бути проходження постійного струму через речовину, проходження потоку тепла з постійним градієнтом температури тощо.

Розглянуте нами кінетичне рівняння Больцмана справедливе:

1. В наближенні парних зіткнень.

2. За умови $\frac{r_0}{l} \ll 1$,

де r_0 - радіус молекул; l - довжина вільного пробігу молекул.

Ці дві умови вимагають достатньо зрідженого газу.

Зауваження: кінетичне рівняння Больцмана можна записувати не тільки для класичних газів, а й для електронного газу в металі і напівпровідниках. Саме з рівняння Больцмана можна з'ясувати залежність таких фізичних величин, як електропровідність та опір від багатьох мікроскопічних параметрів.

§99. Явища переносу

Як вже неодноразово відмічалось, що рівноважна система характеризується повною однорідністю у всіх можливих відношеннях. Інтенсивність процесів переносу прийнято визначати вектором густини потоку. Будемо позначати через $\vec{J}_A$, якщо мова йде про потік адитивної фізичної величини A .

Якщо виділити всередині системи постійний об'єм, то кількість A всередині об'єму дорівнює

$$A_V = \int_V \rho d\tau, \quad (99.1)$$

де $d\tau = dxdydz$, а ρ - густина, тобто кількість цієї величини, на одиницю об'єму.

Після деяких математичних перетворень отримаємо рівняння

балансу:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{div} j_A + q_A, \quad (99.2)$$

де q_A - густина джерел, що показує, яка кількість речовини A створюється в одиниці об'єму за одиницю часу.

Природньо очікувати наявність зв'язків між причинами, що викликають потоки і величинами, що характеризують інтенсивність потоків. Наявність різниці температур викликає перехід теплоти від більш нагрітих областей до менш нагрітих. Для невеликих градієнтів передача теплової енергії здійснюється шляхом теплопровідності. Це явище описується законом Фур'є:

$$\vec{j}_Q = -\chi \operatorname{grad} T, \quad (99.3)$$

де χ - коефіцієнт теплопровідності, який залежить від властивостей речовини і температури; $\vec{j}_Q$ - густина теплового потоку, напрям якого збігається з напрямом поширення теплоти.

Різна густина речовини в системі викликає перехід частинок в напрямку, протилежному градієнту густини. В цьому полягає явище дифузії в однорідній за хімічним складом системі. На основі даних для явища дифузії було знайдено

$$\vec{j}_N = -D' \operatorname{grad} \rho, \quad (99.4)$$

де ρ - густина речовини, а D' - коефіцієнт дифузії.

Використовуючи формулу

$$\mu = kT \ln \rho \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mkT} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (99.5)$$

де $\rho = \frac{m}{V}$.

Тоді отримаємо

$$\operatorname{grad} \mu = \frac{kT}{\rho} \operatorname{grad} \rho, \quad (99.6)$$

а також

$$\vec{j}_N = -D \operatorname{grad} \mu, \quad (99.7)$$

де

$$D = \frac{\rho D'}{kT}. \quad (99.8)$$

Формула

$$\vec{j}_N = -D \operatorname{grad} \mu - \gamma \operatorname{grad} T \quad (99.9)$$

враховує, що потік частинок викликається не тільки градієнтом хімічного потенціалу (дифузія), але і наявністю різниці температур

між різними точками системи (термодифузія).

Термодифузія призводить до того, що в суміші молекул різної маси за наявності градієнта температури виникає різниця концентрації частинок кожного сорту.

Як вже говорилося, основна задача статистичної теорії нерівноважних процесів складається в виведенні макроскопічних співвідношень, що описують окремі явища, на основі деяких моделей мікроскопічного руху в системі.

В якості прикладу можна розглянути молекулярно-кінетичну теорію явища теплопровідності і дифузії в газах.

Дифузія здійснюється за рахунок локального хаотичного руху частинок.

Коефіцієнт дифузії визначається виразом

$$D' = \frac{\ell \bar{v}}{3}, \quad (99.10)$$

де ℓ - середня довжина вільного пробігу; $\bar{v}$ - середня швидкість руху частинок.

Коефіцієнт теплопровідності в одноатомному газі матиме вигляд

$$\chi = \frac{1}{2} k p \bar{v}. \quad (99.11)$$

Формула (99.11) показує, що коефіцієнт теплопровідності в речовині пропорційний середній квадратичній швидкості частинок, густині речовини. Це означає, що чим швидше рухаються частинки речовини та чим більша їх густина, тим ефективніше відбувається передача тепла через цю речовину.

Такий підхід допомагає пояснити фізичні процеси теплопровідності в різних середовищах, від металів до рідин та газів.

§100. Основні положення термодинаміки нерівноважних систем

В термодинаміці рівноважних систем параметри стану завжди характеризують весь об'єм в цілому. Для нерівноважних систем всі величини приходится відносити до окремих ділянок системи, тобто вони повинні розглядатися як локальні (місцеві) макроскопічні характеристики.

Відомо, що час релаксації росте зі збільшенням розмірів системи. Тому окремі малі частини її приходять в рівноважний стан значно раніше, чим встановлюється рівновага між цими малими

частинами. Хоча система в цілому і не знаходиться в рівноважному стані, можна говорити про локальну рівновагу в макроскопічно невеликих частинах системи й описувати їх стан за допомогою всіх тих параметрів і термодинамічних функцій, які використовувались раніше. Тоді передбачається, по-перше, що малі ділянки системи мають ще дуже велике число частинок, по-друге, що відхилення від рівноваги досить мале, по-третє, що розбіжність у властивостях між сусідніми елементарними об'ємами незначна і, в-четверте, що всі процеси в системі проходять досить повільно.

В термодинаміці необоротних процесів постулюється положення про те, що зміна стану локально рівноважних частин системи визначається основним термодинамічним рівнянням

$$TdS = dU + \delta A - \sum_i \mu_i dN_i. \quad (100.1)$$

Зберігаються і раніше встановлені зв'язки між окремими параметрами: рівняння стану, визначення характеристичних функцій тощо. Часто замість повної енергії системи, повної ентропії та інших адитивних величин зручно ввести інтенсивні питомі параметри.

Малі частини великої системи обмінюються енергією, частинками тощо. Цей обмін макроскопічно здійснюється в формі потоків різних величин I_i .

Кількісні характеристики неоднорідностей в системі, що виступають як причини виникнення потоків, називаються в термодинаміці *силами*. Зазвичай це градієнти відповідних інтенсивних параметрів чи їх проекцій. Позначатимемо їх через X_k . Залежність між потоком і силою можна записати в загальному вигляді:

$$I = LX, \quad (100.2)$$

де L - деякий коефіцієнт пропорційності.

Лінійний зв'язок між потоками і силами спостерігається і в тих випадках, якщо потік викликається дією не однієї, а декількома силами. В теорії нерівноважних процесів постулюється загальне правило: потоки I_i і сили, що створюють їх X_k зв'язані лінійною залежністю

$$I_i = \sum_k L_{ik} X_k. \quad (100.3)$$

Величини L_{ik} називають *кінетичними коефіцієнтами*. Вони є функціями від інтенсивних параметрів системи. Кінетичні

коефіцієнти не постійні в часі і не однакові в різних точках системи.

Знаючи залежність термодинамічних параметрів від координат для будь-якого моменту часу, можна обчислити сили X_k як градієнти цих величин. За допомогою виразу (100.3) через сили знаходяться потоки I_i , ті, в свою чергу, визначають швидкість зміни термодинамічних параметрів. В результаті отримаємо замкнену систему рівнянь, за допомогою яких можна знайти зміну стану термодинамічної системи з плином часу, якщо відомі кінетичні коефіцієнти L_{ik} (і задані початкові й граничні умови та потужності джерел).

Проте термодинаміка не дає можливість знайти L_{ik} теоретично, в чому і проявляється відома обмеженість термодинамічного методу. Ці коефіцієнти повинні знаходитись експериментально або обраховуватись методами статистичної фізики.

Визначення коефіцієнтів L_{ik} полегшується завдяки постулату, що введений в термодинаміку Л. Онсагером: матриця кінетичних коефіцієнтів являється симетричною

$$L_{ik} = L_{ki}. \quad (100.4)$$

Як показав Онсагер, рівність (100.4) виконується за певного вибору потоків і сил, а саме: ці величини повинні задовольняти формулу

$$q_s = \sum_i I_i X_i, \quad (100.5)$$

де зліва стоїть густина джерел ентропії. Цей вираз *називається законом виробництва ентропії*. Покажемо, що співвідношення (100.5) завжди може бути виконано.

Припустимо, що стан нерівності системи описується n незалежними параметрами a_i . Кожна із них є певною функцією координат і часу. Швидкість зміни величини a_i зв'язана з густиною потоку $\vec{j}_i$ рівнянням

$$\frac{\partial a_i}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}_i. \quad (100.6)$$

Всі інші термодинамічні величини можна розглядати як функції від a_i . Інші параметри являються складними функціями від a_i . Зокрема, ентропія дорівнює:

$$\rho_s = \rho_s(a_i(x, y, z, t)), \quad (100.7)$$

де ρ_s - локальна густина ентропії.

Локальна густина ентропії - це концепція, що

використовується в теорії інформації та статистичній механіці для опису розподілу інформації (або неузгодженості) у просторі. Вона може застосовуватися до різних систем, включаючи фізичні системи, такі як гази, рідини і навіть до абстрактних систем, таких як комп'ютерні мережі або мовні тексти.

Зазвичай локальна густина ентропії вимірюється як кількість інформації, яка міститься у певному об'ємі простору або у певній області системи. Це дає змогу розуміти, як різні частини системи розподіляють інформацію або, іншими словами, як вони організовані або дезорганізовані.

Зазвичай формули для обчислення локальної густини ентропії можуть включати такі поняття, як розподіл ймовірностей або густину ймовірності у просторі, яку вони враховують. Ці формули можуть варіюватися залежно від конкретного застосування та контексту.

ПИТАННЯ ДЛЯ КОНТРОЛЮ ТА ПЕРЕВІРКИ ЗНАЬ З СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ І ТЕРМОДИНАМІКИ

1. Основні поняття і терміни статистичної фізики та термодинаміки.
2. Історія розвитку молекулярно-кінетичної теорії.
3. Методи вивчення макроскопічних об'єктів (процесів).
4. Макроскопічне та мікроскопічне описання макроскопічної системи.
5. Фазовий простір. Функція розподілу в фазовому просторі.
6. Макроскопічні величини як фазові середні мікроскопічних змінних.
7. Теорема Ліувілля.
8. Зв'язок статистичного розподілу з адитивними законами збереження.
9. Постулат рівноймовірності станів термодинамічної рівноваги - мікроканонічний розподіл.
10. Квазінезалежні системи. Канонічний розподіл Гіббса.
11. Аналіз канонічного розподілу Гіббса. Великий канонічний розподіл Гіббса.
12. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга і квантування фазового простору.
13. Канонічний розподіл Гіббса в квантовій статистиці. Врахування квантової нерозпізнаності мікрочастинок.
14. Вільна енергія системи.

15. Ентропія системи.
16. Основне рівняння рівноважної статистичної термодинаміки (перший закон термодинаміки) як наслідок канонічного розподілу.
17. Узагальнена сила. Зв'язок внутрішньої та вільної енергії.
18. Перший закон термодинаміки.
19. Друге начало термодинаміки для квазістатичних процесів.
20. Ентропія як міра хаосу, міра інформації.
21. Закон зростання ентропії.
22. Основна термодинамічна тотожність. Максимальна робота процесу.
23. Оборотні і необоротні процеси. Друге начало термодинаміки для нестатичних процесів.
24. Нерівність Клаузіуса або другий закон термодинаміки для нестатичних процесів і неізолюваних систем.
25. Деякі фізичні наслідки другого закону термодинаміки.
26. Цикл Карно. Цикл Карно в координатах TS.
27. Поняття температури. Умовна температурна шкала.
28. Термодинамічна шкала температур.
29. Статистична температура. Поняття про цінність внутрішньої енергії.
30. Термодинамічні характеристичні функції (внутрішня енергія, вільна енергія, термодинамічний потенціал Гіббса, ентальпія).
31. Залежність термодинамічних потенціалів від числа частинок.
32. Теплова теорема Нернста. (Третє начало термодинаміки). Наслідки теореми Нернста.
33. Виведення рівняння стану ідеального газу.
34. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за проекціями імпульсу (або швидкості).
35. Розподіл Максвелла - розподіл молекул газу за модулем імпульсу (або швидкості).
36. Розподіл Максвелла-Больцмана. (Розподіл молекул ідеального газу за швидкостями та координатами).
37. Розподіл Больцмана.
38. Класична статистика Максвелла-Больцмана для ідеального газу.
39. Теорема про рівнорозподіл енергії за ступенями вільності в класичній статистиці. Застосування теореми про рівнорозподіл.
40. Класична теорія теплоємності газів. Зв'язок між молярними теплоємностями C_P і C_V .

41. Квантова теорія теплоємності.
42. Реальний газ. Статистичний інтеграл для реальних газів в наближенні парних зіткнень.
43. Наближені вирази для термодинамічних функцій реального газу.
44. Рівняння Ван дер Ваальса.
45. Екстремальні властивості термодинамічного потенціалу Гіббса і умови рівноваги фаз.
46. Поняття про різні фази речовини.
47. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса.
48. Рівновага систем: тверде тіло-рідина, рідина-газ. Критична точка.
49. Рівновага трьох фаз речовини. Потрійна точка.
50. Багатокомпонентні системи. Правило фаз Гіббса.
51. Визначення мікростану системи в квантовій статистичній фізиці.
52. Мікροканонічний розподіл в квантовій статистичній фізиці.
53. Квантовий канонічний розподіл Гіббса.
54. Великий квантовий канонічний розподіл Гіббса.
55. Квантовий ідеальний газ. Симетричні та антисиметричні стани.
56. Числа заповнень.
57. Функція розподілу за мікростанами для ферміонів і бозонів.
58. Аналіз розподілів Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.
59. Розподіл Гіббса в напівпровідниках.
60. Порівняння квантових і класичного розподілів.
61. Електронний газ в металі. Рівноважне випромінювання як ідеальний газ фотонів.
62. Поняття про флуктуації. Принцип Больцмана. Розподіл Гауса.
63. Флуктуації основних термодинамічних величин.
64. Кінетичне рівняння Больцмана.
65. Явища переносу.
66. Основні положення термодинаміки нерівноважних систем.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА З СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ І ТЕРМОДИНАМІКИ

Статистична фізика і термодинаміка

1. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Основи статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник. К.: Вища школа, 2004. 255 с.

2. Єрмолаєв О.М., Рашба Г.І. Вступ до статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник. Х.: ХНУ, 2004. 516 с.

3. Кобилянський В.Б. Статистична фізика; За загальною редакцією члена-кореспондента АН УРСР Юхновського І.Р. К.: Вища школа, 1972. 244 с.

4. Коновалов В.М. Курс теоретичної фізики: Термодинаміка: Підручник для фізико-математичних факультетів педагогічних інститутів. К.: Державне учбово-педагогічне видавництво «Радянська школа», 1962. 296 с.

5. Сільвейстр А.М., Моклюк М.О. Теоретична фізика: Статистична фізика та термодинаміка. Задачі та вправи: для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів педагогічних закладів вищої освіти. Вінниця. ТОВ «Твори», 2023. 142 с.

6. Статистична фізика. Посібник для студентів вищих навчальних педагогічних закладів освіти / Автори-укладачі: Недибалюк А.Ф., Сільвейстр А.М., Солоненко В.І. Вінниця: ТОВ Фірма «Планер», 2007. 193 с.

7. Термодинаміка і статистична фізика (курс лекцій): навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів фізико-математичних спеціальностей. / Укладач: Дудик В.М. Умань: ПП «Жовтий», 2015. 132 с.

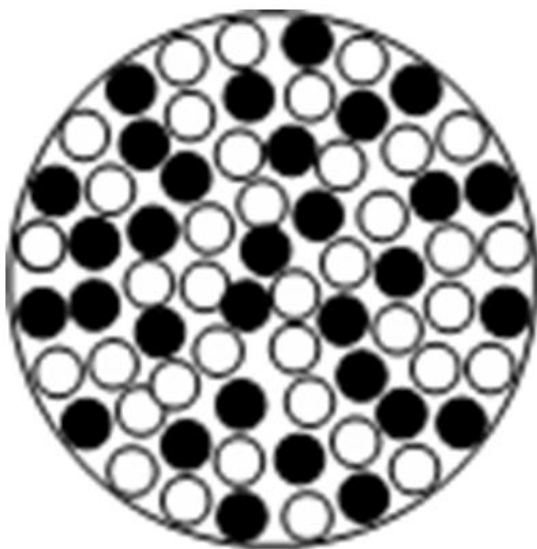
8. Черниш Л.В. Основи статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник для студентів фізико-математичних факультетів педагогічних університетів та інститутів. Частина 1. Вінниця: ДОВ «Вінниця», 2001. 289 с.

9. Федорченко А.М. Вступ до курсу статистичної фізики та термодинаміки. К.: Вища школа. Головне видавництво, 1973. 188 с.

10. Федорченко А.М. Теоретична фізика. Т.2. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. К.: Вища школа, 1993. 415 с.

Розділ 2.

ЯДЕРНА ФІЗИКА



Лекція 30. ВСТУП ДО ЯДЕРНОЇ ФІЗИКИ

§101. Предмет ядерної фізики. Історичні етапи її розвитку. Ядерна модель атома за Резерфордом. Протонно-нейтронна модель ядра. Ядерна фізика і фізика елементарних частинок.

§102. Фундаментальна взаємодія між частинками: електромагнітна, гравітаційна, сильна і слабка взаємодії.

§103. Опис стану руху елементарних частинок. Закони збереження у перетворенні ядер та елементарних частинок.

[3. §2.1; 5. §1.1, §1.8; 5. §2.1-§2.4; 6. §1.1, §1.2, §2.5; 7. §1-§3; 9. §1.1-§1.3]

§101. Предмет ядерної фізики. Історичні етапи її розвитку. Ядерна модель атома за Резерфордом. Протонно-нейтронна модель ядра. Ядерна фізика і фізика елементарних частинок

Ядерна фізика вивчає будову атомів, їх взаємодії та перетворення, тобто ядерні реакції. З іншого боку, *ядерна фізика* - це наука про структуру атомних ядер, властивості ядерних сил, закони змін і перетворень ядер під час розпаду або ядерних реакціях, взаємодіях ядерного випромінювання з речовиною та елементарними частинками. Завдання ядерної фізики - це типовий приклад задач декількох тіл. Ядра складаються з нуклонів (протонів і нейтронів). В типових ядрах містяться десятки або сотні нуклонів. Це число занадто велике для точного розв'язування задач, але все ж занадто мале для того, щоб можна було користуватися методами статистичної фізики, що і призвело до великої різноманітності різних моделей атомних ядер.

Практичне значення вивчення ядерної фізики дає можливість одержати керовані термоядерні реакції - реакції синтезу. Ядерна фізика широко застосовується в енергетиці та техніці, в біології й медицині. Нові дані про елементарні частинки продовжують змінювати і збагачувати наші уявлення про властивості матерії.

Ядерна фізика має початком 1911-1912 роки, тобто це є молода галузь науки. Наприкінці XIX століття в науці стали відомі факти, які показували, що атом - це складна електрична система. Ці факти були встановлені під час вивчення явищ електролізу, катодних і анодних променів, і особливо радіоактивних явищ.

У 1896 р. французький фізик А.А. Беккерель (1852-1908) відкрив радіоактивне випромінювання.

У 1897 р. англійський фізик Дж.Дж. Томсон (1856-1940) досліджуючи катодне проміння, відкрив електрон і визначив його питомий заряд $\frac{e}{m}$. У 1903 р. він зробив першу спробу побудувати теорію атома в межах класичної фізики.

Французькі вчені М. Склодовська-Кюрі (1867-1934), П. Кюрі (1859-1906) відкрили радіоактивний розпад, чим змінили уявлення про атом як про систему взаємодіючих заряджених частинок, відповідно до теорії голландського фізика Х. Лоренца.

Важливими для пізнання будови атома були досліді із зондування атома пучками швидких частинок проведені німецьким фізиком Ф.Е.А. Ленардом (1862-1947). В 1903 р., Ленард досліджуючи проходження крізь тіла пучків швидких електронів, дійшов висновку, що весь атом не може бути позитивно зарядженим, він повинен мати складнішу будову.

Подальші вивчення радіоактивності привели англійського радіохіміка Ф. Содді (1877-1956) до відкриття ізоотопів, тим самим зруйнувавши наукові уявлення про абсолютну ідентичність усіх атомів одного хімічного елемента.

Ядерна фізика зародилась тоді, коли були поставленні досліді англійського фізика Е. Резерфорда (1871-1937), який побудував планетарну модель атома. Досліді дали змогу Е. Резерфорду створити ядерну (планетарну) модель атома: в його центрі знаходиться позитивно заряджене ядро, розміри якого приблизно становлять 10^{-15} м; навколо ядра по замкнених орбітах в об'ємі сфери радіусом 10^{-10} м обертаються електрони, причому кількість їх дорівнює порядковому номеру елемента. В такому вигляді ядерна модель атома зберегла своє значення і до нашого часу, хоча й зазнала багатьох уточнень. Ним було доведено, що ядро складається з протонів і нейтронів. Наприклад, $^{65,37}_{30}\text{Zn}$ має 30 протонів та 35 нейтронів.

Використавши формулу Резерфорда, сам Е. Резерфорд, а пізніше його учень англійський фізик Дж. Чедвік (1891-1974) зуміли досить точно визначити значення позитивних зарядів різних атомних ядер. Ними був виявлений надзвичайно важливий факт, що позитивний заряд ядра атома, виражений в елементарних зарядах e , дорівнює порядковому номеру Z елемента в таблиці Менделєєва, тобто $q = eZ$.

У всій області масштабів ядерної фізики речовина зустрічається лише у двох формах: в формі атомних ядер і в формі елементарних частинок. Фізика елементарних частинок являє собою самостійний розділ ядерної фізики, який має важливе світоглядне значення, оскільки в ній особливо яскраво проявляється діалектичний характер перетворення матерії з одного виду в інший. Як ми побачимо в подальшому розгляді даної теми, це не заважає світу ядерної фізики бути не менш цікавим і різноманітним, ніж світ атомної фізики, світ агрегатних станів речовини, світ астрономічних масштабів.

Ми будемо, в основному, звертати увагу на експериментальні основи ядерної теорії атома та деякі елементи квантової фізики. Щодо експериментальних даних, то будемо описувати, яким чином ці дані отримані та дати поняття про порядок величин, з якими будемо мати справу.

Отже, ядерна фізика базується на моделі протонно-нейтронної будови ядра атома та може вимірювати просторовий $l_0 = 10^{-15}$ м і часовий $\tau_0 = (10^{-23} \div 10^{-24})$ с інтервали.

§102. Фундаментальна взаємодія між частинками: електромагнітна, гравітаційна, сильна і слабка взаємодії

Ядерна фізика взяла на своє озброєння чотири фундаментальні взаємодії:

- електромагнітна;
- гравітаційна;
- сильна;
- слабка.

1. *Електромагнітні взаємодії* - проявляються між електромагнітними полями і електричними зарядами. Заряди в ядерній фізиці оцінюються електронними (елементарними) зарядами. Наприклад, $Q = 3$ (3 електронних заряди), $q = 3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл.

Енергія електромагнітного поля має квантову структуру:

$$\mathcal{E} = \hbar\omega.$$

Фотон як частинка характеризується спіновим числом $s = 1$ (бозони). Швидкість розповсюдження фотона $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}}$. Маса спокою фотона порядку 0. Час життя фотона прямує до нескінченності (∞). Радіус дії прямує також до нескінченності (∞).

Для оцінки інтенсивності електромагнітних взаємодій

вводиться безрозмірний параметр

$$\alpha_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \approx 7,3 \cdot 10^{-3}.$$

Якщо фотон (γ – квант) має енергію, яка перевищує 1 МеВ, то він під час взаємодії з ядрами може перетворюватись:

$$\gamma \rightleftharpoons e^+ + e^-.$$

2. *Гравітаційна взаємодія* оцінює ту силу, з якою дві точкові маси притягаються. Вона існує лише у вигляді притягання. Також повинні існувати кванти гравітаційного поля – гравітони, їх маса спокою повинна дорівнювати нулю, а їх швидкість повинна бути рівна c . Для оцінки гравітаційних полів вводиться безрозмірний параметр

$$\alpha_{\text{од}} = \frac{Gm^2}{\hbar c}.$$

Наприклад, для протона $\alpha_{\text{од}} \approx 6 \cdot 10^{-39}$.

Ядерна фізика визначає цю взаємодію, співставляючи інтенсивність на основі народження фотона, а час народження гравітона 10^{30} с.

3. *Сильна взаємодія*. Х. Юкава показав, що енергія взаємодії в ядрі залежить від відстані

$$U(r) = -\frac{q^2}{r} e^{-\frac{r}{a}};$$
$$a = 2 \cdot 10^{-15} \text{ м};$$

$$g = 6,65 \cdot 10^{-13} \text{ (кг} \cdot \text{м}^3 \cdot \text{с}^{-2})^{\frac{1}{2}}.$$

Сильна ядерна взаємодія найпотужніша з взаємодій. Однак, вона проявляється на малих відстанях (10^{-15} м, відстані спірозмірні з розміром ядра атома), пов'язує разом кварки, а також пов'язує протони і нейтрони в ядрі атома. Частинками-носіями сильної ядерної взаємодії за сучасними уявленнями є *глюони*. Їх всього 8 типів, кожен з яких має нульову масу (маса спокою) і нульовий заряд. На відміну від обмінних частинок інших взаємодій, глюони можуть взаємодіяти один з одним через інший глюон.

Сильна ядерна взаємодія була вперше описана японським вченим-фізиком Хідекі Юкава в 1935 р. з використанням обмінних частинок – *мезонів*. Наприклад, взаємне перетворення нуклонів у ядрі атома:

$$p \rightleftharpoons n + \pi^+; \quad p \rightleftharpoons p' + \pi^0;$$
$$n \rightleftharpoons p + \pi^-; \quad n \rightleftharpoons n' + \pi^0,$$

де π^+ , π^- , π^0 - позитивний, негативний і нейтральний π -мезони.

Цей процес носить зворотний характер про, що свідчать стрілки ($\rightleftharpoons$) - процес розкладу. В процесі дисоціації нуклонів у ядрі існує мезонне поле. Час формування π -мезонного поля складає $10^{-23} - 10^{-24}$ с. Причиною виникнення цього поля є існування ядерних взаємодій, які характеризуються величиною: $\frac{q^2}{\hbar c} \approx 14$.

Ядерні сили перевищують електромагнітні сили за інтенсивністю в $2 \cdot 10^3$ разів. Зі збільшенням відстані r між нуклонами енергія надзвичайно швидко зменшується. Наприклад, якщо $r = 5a$, то енергія зменшується в 273 рази ($r = 5a = 10^{-14}$ м).

Ядерні сили - це сили притягання, а кулонівські сили у ядрі атома - відштовхування. Величина a , що входить у формулу Х. Юкави визначається:

$$a = \frac{\hbar}{m_{\pi} c},$$

тобто вона є комптонівською довжиною хвилі π -мезона.

Сильні взаємодії характеризуються не лише властивістю короткодії, але малим часом. Цей час оцінюється Юкавою співвідношенням:

$$\tau = \frac{a}{c},$$

де τ - час переміщення π мезона на відстань a .

4. *Слабкі взаємодії.* Ця взаємодія була введена в 30-х роках минулого століття, коли стали досліджувати ряд ядерних процесів. Виявилося, що час протікання не в $10^{-23} - 10^{-24}$ с, а 10^{-12} характерний для слабких взаємодій. Під час реакцій взаємних перетворень елементарних частинок отримуються (народжуються) електрони, μ -мезони, нейтрино та їх античастинки: позитрон, μ^- -мезон, антинейтрино тощо. Нейтрон у вільному стані живе приблизно 10^3 с, а потім зазнає розпаду:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e,$$

де $\bar{\nu}_e$ - антинейтрино електричного походження.

Протон має велику кінетичну енергію - він сильно збуджений і перетворюється

$$p \rightarrow n + e^+ + \bar{\nu}_e, \quad \mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_{\mu},$$

де ν_{μ} - антинейтрино мезонного походження.

Для таких перетворень розраховано безрозмірний параметр $\alpha = 10^{-12}$. Є тенденції про зведення всіх чотирьох взаємодій до

однієї на основі єдиної теорії поля.

§103. Опис стану руху елементарних частинок. Закони збереження у перетворенні ядер та елементарних частинок

З курсу класичної механіки відомо, що рух тіл можна описувати двома рівняннями

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial r},$$

де H - функція Гамільтона.

Тобто

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r); \quad \dot{p} = -\frac{\partial U}{\partial r} = F.$$

Але виявилось, що такі формули не можна застосувати для ядерних частинок, тому що ядро і нуклони треба віднести до мікрочастинок.

Відомо, що для мікрочастинок характерне співвідношення невизначеностей Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar.$$

Точно ми не можемо визначити одночасно координату і імпульс (енергію і час)

$$x \cdot p \geq \hbar.$$

Але якщо зробити деякі припущення, тоді перейшовши від знаку нерівності до рівності, то можна записати, наприклад, що

$$x = \frac{\hbar}{p}.$$

Енергія буде $T \approx 10^7$ еВ, тобто

$$T = \frac{p^2}{2m}, \quad p = \sqrt{2mT},$$

де m - маса ядра.

Знайшовши p ми можемо розрахувати розміри ядра x , виявилось, що вони $x \approx 10^{-14}$ м. Можна знайти довжину хвилі де Бройля:

$$\lambda_B = \frac{\hbar}{p} = 5 \cdot 10^{-15} \text{ м},$$

де λ_B - довжина хвилі де Бройля.

Розміри ядра такого ж самого порядку як і довжина його хвилі де Бройля. Отже, тут треба використати закони квантової механіки:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(r),$$

де $\hat{H}$ - оператор енергії, $\hat{P}$ - оператор імпульсу.

$$\hat{P} = -i\hbar \nabla,$$

де ∇ - оператор Лапласа.

$$\hat{P}^2 = -\hbar^2 \nabla^2.$$

Тоді

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r).$$

Якщо ядро рухається за інерцією (вільно, без впливу будь-яких сторонніх факторів), то рівняння Шредінгера набуде вигляду:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

Його розв'язок за умови $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}.$$

Для всіх ядерних перетворень виходячи із законів фізики і, зокрема, квантової теорії, спостерігається збереження всіх законів: збереження електричного заряду, збереження енергії та імпульсу, збереження баріонного (ядерного заряду), збереження ізотопічного спіну, збереження лептонного заряду, (збереження ізотопічного спіну викликається в слабких взаємодіях), збереження дивності, збереження парності (під час слабких взаємодіях).

Лекція 31. ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМНОГО ЯДРА

§104. Будова атомного ядра. Основні властивості та характеристики нуклонів.

§105. Заряд атомного ядра. Досліди Мозлі.

§106. Маса атомного ядра та способи її визначення. Енергія зв'язку та дефект маси атомного ядра. Ізобари, ізотопи, ізотони.

§107. Розміри ядра і способи їх визначення.

[3. §1.1-§1.3; 5. §2.1, §2.2, §2.10, §2.11, §3.3; 6. §1.3-§1.5; 9. §2.1-§2.4]

§104. Будова атомного ядра. Основні властивості та характеристики нуклонів

Кожний атом володіє негативною зарядженою електронною оболонкою і позитивно зарядженим атомним ядром. В ядрі зосереджена майже вся (більш 99,95%) маса атома. З точки зору атомних масштабів ядра володіють дуже малими розмірами і колосальною міцністю.

Атомні ядра складаються з елементарних частинок - протонів і нейтронів. Протонно-нейтронна модель атома взята за основу згідно моделі Іваненка-Гейзенберга. Так як, ядро складається з протонів і нейтронів, то вони (протони і нейтрони) безперервно дисоціюють і обмінюються мезонами.

Деякі характеристики нуклонів (табл. 4):

Q - заряд (виражено в зарядах електрона);

s - спінове число (в одиницях $\hbar$);

p_e - електричний момент (квадрупольний момент ядра - має розмірність площі та зазвичай вимірюється в одиницях барн, 1 барн = 10^{-24} см²) - величина, що характеризує відхилення розподілу електричного заряду в атомному ядрі від сферично симетричного;

p_m - магнітний момент (в ядерних магнетонах);

M - маса (в електричних масах);

$W_{зв}$ - енергія зв'язку (в MeV) та ін.

Одиниці, які були введені для визначення магнітного моменту - ядерні магнетони визначаються подібно до магнетона Бора, а саме:

$$\mu_{\text{я}} = \frac{e\hbar}{2M_p} = 5,050 \cdot 10^{-27} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}};$$

$$1 \text{ а. о. м.} = 1,66057 \cdot 10^{-27} \text{ кг};$$

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ а. о. м.};$$

$$M_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,00728 \text{ а. о. м.};$$

$$M_n = 1,6750 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,00767 \text{ а. о. м.}$$

Таблиця 4

	Q , (в зарядах електрона)	M , (в електричних масах)	s , (в одиницях $\hbar$)	p_m , (в ядерних магнетонах)	p_e , $\cdot 10^{-24}$ см ²	$W_{зв}$, MeV	τ - час життя (в секундах)
Протон p	1	1836	1/2	2,79		938,27	стабільний ($> 10^{34}$) років 885,7
Нейтрон n	0	1838	1/2	-1,91		939,57	

Спіновий і магнітний моменти протону співпадають за напрямом, а в нейтрона - $\vec{s}_n$ і $\vec{p}_{mn}$ антипаралельні (рис. 86). Відповідно існують античастинки до них: $\bar{p}$ - антипротон; $\bar{n}$ - антинейтрон.

Якщо існують античастинки, то мусить існувати і антиматерія. Коли речовина і антиматерія об'єднуються, то відбувається анігіляція і виділяється велика енергія.

Досліди показують, що радіус R ядер залежить від кількості нуклонів, які входять до складу ядра. Ця залежність може бути виражена емпіричною формулою

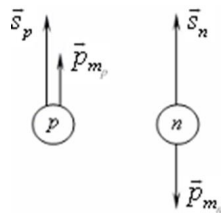


Рис. 86

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}}, \quad (104.1)$$

де r_0 - стала величина, яка визначає середній радіус нуклона; A - масове число ядра.

Розміри атомних ядер визначають експериментально за розсіюванням протонів, швидких нейтронів, електронів високих енергій. Існує і ряд інших методів визначення розмірів ядер. Вони ґрунтуються на зв'язку довговічності α -радіоактивних ядер з енергією випущених ними α -частинок; на оптичних властивостях так званих мезоатомів, в яких один із електронів тимчасово замінено захопленням мюоном; на порівнянні енергії зв'язку пари дзеркальних атомів та ін. Ці методи підтверджують емпіричну залежність (104.1). За допомогою цих вимірювань встановлено:

- із електромагнітних методів визначено, що

$$r_0 \sim 1,2 \cdot 10^{-15} \text{ м};$$

- із ядерних методів визначення:

$$r_0 \sim 1,4 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$$

За одиницю відстаней в ядерній фізиці і фізиці елементарних частинок приймається *фермі* (*фемтометр*), який дорівнює 10^{-15} м ($1 \text{ фм} = 10^{-15} \text{ м}$).

Різні значення r_0 , отримані із різних дослідів, виражають декілька різних властивостей ядра: з одного боку, це радіус ядерних взаємодій і розподіл ядерної речовини, а з іншого боку - радіус розподілу електричного заряду.

§105. Заряд атомного ядра. Досліди Мозлі

Заряд ядра Z дорівнює номеру під яким записаний елемент в

таблиці Менделєєва. Перші експериментальні результати по визначенню заряду ядра зробив Резерфорд в 1911 році (рис. 87). Учень Резерфорда Мозлі використав інший метод ніж його вчитель (Резерфорд) по визначенню заряду ядра Z . Резерфорд досліджував бомбардування α - частинок. Відомо було, що валентні електрони переходять з однієї орбіти на другу, випромінюючи кванти світла.

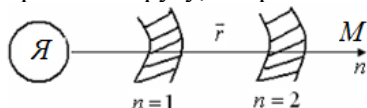


Рис. 87

При внутрішніх переходах випромінюються кванти більш високих енергій (рентгенівське випромінювання).

Формула Бальмера:

$$\nu = RZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Домножимо на $\hbar$, отримаємо:

$$\hbar\omega = RZ^2\hbar \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = W_2 - W_1.$$

Формула спрацьовує для водню і водневоподібних атомів, а для складніших - ні. Вона впливає із закону Кулона, так наприклад, потенціал

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r}.$$

Для інших атомів, треба враховувати, ще коефіцієнт послаблення. У складному атомі, який характеризується багатьма оболонками

$$\varphi_n(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(Z - S_n)e}{r};$$

$$W_2 - W_1 = R(Z - S_n)^2\hbar \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Формула Бальмера повинна враховувати ефект екранування електричної оболонки

$$W_n = - \frac{R(Z - S_n)^2\hbar}{n^2}.$$

Для того, щоб мінуса не існувало, Мозлі ввів поняття спектрального терму

$$T_n = -\frac{W_n}{\hbar} = \frac{R(Z - S_n)^2}{n^2},$$

де T_n - спектральна терма n -порядку; R - стала Рідберга.
Тобто

$$T_n = \frac{R(Z - S_n)^2}{n^2}.$$

Використавши математичний аналіз Мозлі одержав (рис. 88):

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}} = \frac{Z - S_n}{n}.$$

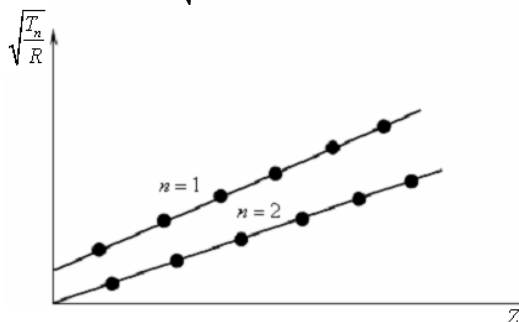


Рис. 88

Ядро будь-якого атома характеризується позитивним зарядом, величина цього заряду $+Ze$, де Z - це порядковий номер елемента в періодичній таблиці Менделєєва.

Тобто

$$Q = Z.$$

Число протонів в ядрі повинно бути рівне Z . Електричний заряд зберігається у всіх видах взаємодій, що розглядаються в ядерній фізиці (сильні, електромагнітні, слабкі).

§106. Маса атомного ядра та способи її визначення. Енергія зв'язку та дефект маси атомного ядра. Ізобари, ізотопи, ізотони

Маса ядра є надзвичайно важливою його характеристикою. Науковці довго намагалися максимально точно визначити масу ядра. Один із методів визначення маси ядра впливає із співвідношення:

$$W^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4.$$

Треба експериментально визначити W і p та знайти m_0 . Такий метод неточний, тому у практиці прийшли до іншого - методу *парабол Томсона*. Заряд частинки ядра пропускається через сукупність паралельно розташованих електричних і магнітних полів та за параболою, які утворюються на світних екранах визначають масу ядер. Точність цих двох методів невелика. Третій метод виявився більш точним - *метод мас-спектрографів*. Сучасна наука надає перевагу *мас-спектрографу Бейноріджа*. Цей прилад є нащадком установки Томсона. Однак тут магнітні і електричні поля орієнтуються по іншому - їх силові лінії взаємоперпендикулярні. Фільтр відбирає серед ядер, які мають великий набір швидкостей, тільки ядра певної швидкості (див. рис. 89). На рисунку 89 наведено позначення: Φ - фільтр; D_1 , D_2 - діафрагми.

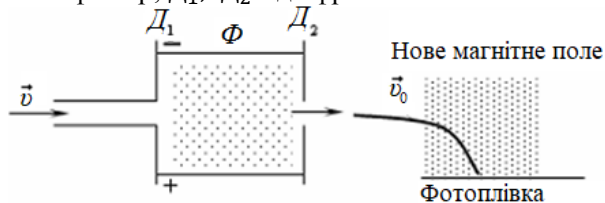


Рис. 89

Запишемо формули, що мають місце у зміщеннях під дією полів як електричного так і магнітного:

- зміщення під дією електричного поля:

$$Y_E = \frac{eE}{m} \cdot \frac{t^2}{2};$$

- зміщення під дією магнітного поля:

$$Y_B = \frac{veB}{m} \frac{t^2}{2}.$$

Нехай для певної швидкості $Y_E = Y_B$:

$$v_0 B = E, \rightarrow v_0 = \frac{E}{B},$$

$$\frac{mv_0^2}{r} = ev_0 B,$$

де r - радіус кривизни.

$$r = \frac{mv_0}{eB}.$$

Прилад виявився таким точним, що значення мас можна одержувати було після коми з точністю до 8 знаків. Це видно з нижче

наведеної таблиці 5.

Таблиця 5

Елемент	Маса, а.о.м.	Питома енергія зв'язку $f = \frac{W_{зв}}{A}$, МеВ
Нейтрон ${}^1_0n$	1,00286344±43	
Водень ${}^1_1H$	1,00782522±18	
${}^2_1H$	2,01410219±11	1,1123
${}^3_1H$	3,01604940±23	2,8274
Гелій ${}^3_2He$	3,016002994±23	2,5726
${}^4_2He$	4,00260961±37	7,0740
${}^5_2He$	5,012296±21	5,4676
${}^6_2He$	6,018900±18	4,8765
Літій ${}^5_3Li$	5,012541±40	5,2656
${}^6_3Li$	6,0151263±1	5,3318
${}^7_3Li$	7,0160053±11	5,6062
${}^8_3Li$	8,0224884±16	5,1596

Аналогічні сорти атомів було виявлено для інших елементів, наприклад, для

вуглецю: ${}^{11}_6C$, ${}^{12}_6C$, ${}^{13}_6C$, ${}^{14}_6C$;

кисню: ${}^{15}_8O$, ${}^{16}_8O$, ${}^{17}_8O$, ${}^{18}_8O$;

хлору: ${}^{32}_{17}Cl$, ${}^{33}_{17}Cl$, ${}^{34}_{17}Cl$, ${}^{35}_{17}Cl$, ${}^{36}_{17}Cl$, ${}^{37}_{17}Cl$, ${}^{38}_{17}Cl$, ${}^{39}_{17}Cl$, ${}^{40}_{17}Cl$.

Для прикладу полоній ${}_{84}Po$ має 25 ізоотопів. Виявилось, що всі без винятку ядра для даного елемента характеризуються одним і тим же Z - протонів.

Ізотопи - це такі ядра, число протонів в яких однакове ($Z = \text{const}$), лише відрізняються числом нейтронів, але фізичні й хімічні властивості дуже подібні. Наприклад, H_2O - звичайна вода і важка вода. У звичайну воду входить водень ${}^1_1H$.

Виявлені такі ядра різних елементів, що сума кількостей протонів і нейтронів (масове число) однакова - *ізобари*:

$$Z_1 + N_1 = Z_2 + N_2.$$

Ядра атомів ${}^3_1H$ і ${}^3_2He$ є ізобарами, у них однакове число нуклонів (протонів і нейтронів). Також було виявлено ядра різних елементів, для яких кількість нейтронів однакова - *ізотони*.

Якщо заокруглити масу ядер ізоотопів до цілих чисел, то ці цілі числа називаються *масовими числами ядер*. Наприклад, A - масове

число

$$Z + N = A,$$

де Z - число протонів; N - число нейтронів.

Отже, масове число будь-якого ядра дорівнює сумі $Z + N = A$.

Дослідження мас атомних ядер показали, що для всіх без винятку ядер наявний дефект маси. Очевидно, що ця величина

$$\Delta m = ZM_p + NM_n - M_{\text{я}} > 0,$$

де Δm - дефект мас.

Величина дефекту мас дає можливість нам зробити висновок, що в кожному ядрі є певний запас енергії зв'язку - енергії необхідної для того, щоб розкласти ядро на компоненти, переборюючи ядерні сили взаємодії. Коли нуклони зближаються і виявляються на віддалі порядку $a = 2 \cdot 10^{-15}$ м, то починають діяти сили ядерної взаємодії. Випромінюється енергія $\Delta \mathcal{E} = \Delta mc^2$. Це робить ядро нестійким. Дане явище було пояснене на основі спеціальної теорії відносності (СТВ). Енергія зв'язку подається у таблиці 5. Для теоретичних цілей ліпше ввести поняття питомої енергії зв'язку. Її позначають - f і домовились визначати так:

$$f = \frac{W_{\text{зв}}}{A};$$

$$W_{\text{зв}} = \Delta mc^2.$$

Питома енергія зв'язку - це та енергія зв'язку, яка приходить на один нуклон ядра. Аналіз експериментальних даних щодо енергій зв'язку дає багато цікавої інформації про властивості ядер. Для її з'ясування розглянемо наведені графічні залежності питомої енергії зв'язку від масового числа для стабільних ядер (рис. 90-92).

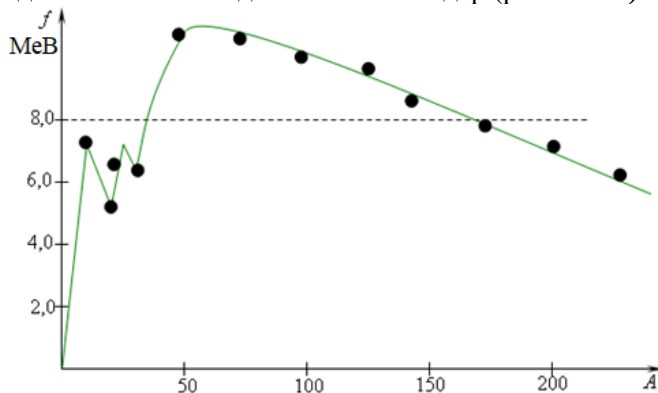


Рис. 90

Якщо відкинути значення для легких ядер, то в загальному випадку, можна сказати, що питома енергія зв'язку стала і дорівнює приблизно 8 МеВ/нуклон (рис. 90). Наближена незалежність питомої енергії зв'язку від числа нуклонів свідчить про властивість насичення ядерних сил. Властивість ядерних сил полягає в тому, що кожен нуклон може взаємодіяти тільки з деякими сусідніми нуклонами.

Питома енергія зв'язку не строго стала величина, а має максимум ($\approx 8,8$ МеВ) для $A \approx 56$ (рис. 91), тобто в області ядер заліза, спадає до обох країв. Максимум кривої відповідає найбільш стабільним ядрам.

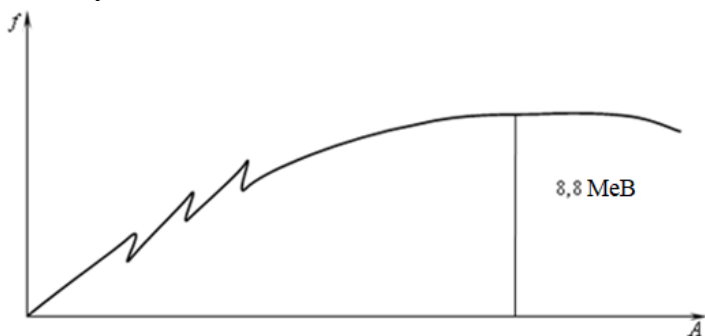


Рис. 91

На рисунку 92 зображено енергетичну поверхню, яка має переріз з вертикальною циліндричною поверхнею.

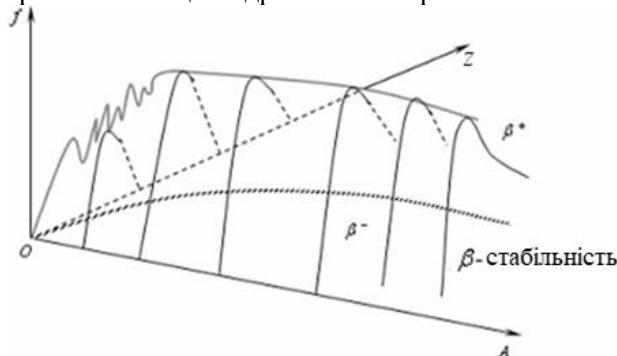


Рис. 92

Отриманий переріз буде проходити на площині (A, Z) через доріжку β -стабільних ядер. Це саме багатий переріз. Він містить

інформацію про властивості приблизно 350 β -стабільних ядер. Серед них є легкі і важкі, стабільні та α -радіоактивні, з різними спінами, різні за парністю, що містяться в них нуклонів ($p - p, p - n, n - p$ і $n - n$) і за іншими властивостями.

Вивчення цього перерізу дає найбільш обширну інформацію про властивості ядер і ядерних сил.

§107. Розміри ядра і способи їх визначення

Розміри ядра важлива характеристика його і має таке ж саме значення як маса, спін тощо. Тому для визначення розмірів ядра було використано багато різних методів. Під *розміром ядра* будемо розуміти радіус сфери, яку займає ядро разом із нуклонами.

Виділимо п'ять основних методів визначення розмірів ядра атома (R):

1. Визначення за енергію випромінювання частинок радіоактивних елементів (рис. 93).

2. На основі розсіювання швидких нейтронів на ядрах.

3. На основі спектральних термів рентгенівського випромінювання μ -мезонних атомів.

4. На основі закономірностей розсіювання швидких електронів на ядрах.

5. За оцінкою різниці енергії зв'язку в дзеркальних ізобарах.

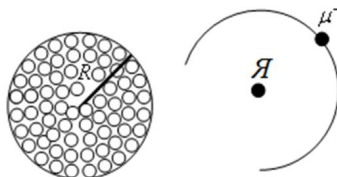


Рис. 93

Ці п'ять методів дали можливість оцінити радіус ядер всіх елементів

$$R = r_0 \sqrt[3]{A},$$

де r_0 - константа, що рівна $r_0 = (1,45 - 1,50) \cdot 10^{-15}$ м; A - масове число ядра.

Для заліза ($^{56}_{26}\text{Fe}$) $R = 6 \cdot 10^{-15}$ м, для свинцю ($^{207}_{82}\text{Pb}$) $R = 10^{-14}$ м. Радіус повільно міняється під час переходу від одного ядра до іншого.

Розглянемо в деяких деталях другий спосіб визначення ядра. Потік нейтронів досить високих енергій (100 MeV) спрямовують на пластинку (рис. 94), то основна частина нейтронів після взаємодії буде рухатись далі без змін, а решта розсіюються.

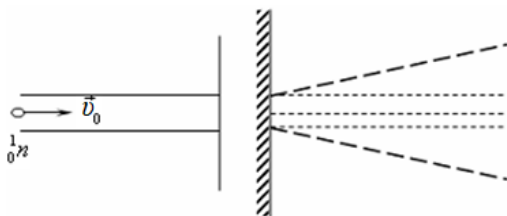


Рис. 94

Нехай кількість нейтронів ΔN , що розсіюється за одиницю часу рівна:

$$\Delta N = \delta n_0 \vec{v}_0 N,$$

де ΔN - кількість нейтронів, які розсіюються; δ - ефективний переріз взаємодії нейтрона з ядром; $n_0 v_0$ - густина нейтронів; n_0 - концентрація нейтронів.

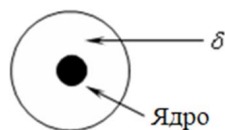
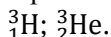


Рис. 95

Ефективний переріз завжди більший від перерізу ядра (рис. 95). Теоретичні дослідження показали, що $\delta = 2\pi R^2$. Тоді визначивши δ , можна знайти R .

Наступний метод визначення R ядра базується на різниці енергії зв'язку дзеркальних ізобарів



Наступний ізобар повинен характеризуватися вищою енергією $W_{зв}$. Виявилася зовсім інша картина (див. табл. 6).

Таблиця 6

Елемент	$W_{зв}$, MeB	$\Delta W_{зв}$, MeB
${}^3_1\text{H}$	8,4823	0,7644
${}^3_2\text{He}$	7,7179	
${}^7_3\text{Li}$	39,244	1,843
${}^7_4\text{Be}$	37,601	

Ядерні сили однакові, а енергія зв'язку відрізняється. Це тому, що зайвий протон формує поле, енергія взаємодії тут має від'ємний знак. Значить енергія зв'язку зменшується.

Нехай є два ізобари $Z, Z + 1$. Ядро має деякий об'єм (рис. 96).

Знайдемо потенціал. Внаслідок хаотичного руху його заряд розподілився по всьому об'єму

$$\varphi(r) = \frac{e}{2\varepsilon_0 V} \left(R^2 \frac{1}{3} r^2 \right).$$

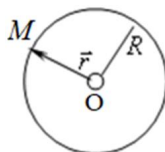


Рис. 96

Ставиться задача, яка енергія цих зарядів, розміщених в полі ядра

$$W = \frac{1}{2} \int_V \rho \varphi dV,$$

$$\rho = \frac{Ze}{V},$$

де ρ - це густина заряду, яка формується в полі ядра.

Після інтегрування отримаємо:

$$W = \frac{\delta Ze^2}{S} \frac{1}{R} \frac{1}{4\pi\epsilon_0}.$$

За рахунок електричної взаємодії додаткового протона виникає ця енергія.

Загалом, визначення розміру ядра атома - це складний процес, який вимагає комбінації експериментальних даних та теоретичних розрахунків. Різні методи надають додаткову інформацію про структуру ядра, доповнюючи один одного для отримання повного розуміння його розміру та властивостей.

Лекція 32. РАДІОАКТИВНИЙ РОЗПАД ЯДЕР

§108. Загальні закономірності радіоактивного розпаду ядер. Рівняння стану вікової рівноваги.

§109. α -радіоактивний розпад. Експериментальні особливості α -розпаду.

§110. Теорія α -радіоактивного розпаду. Визначення радіуса ядра на її основі.

§111. β -радіоактивний розпад і його теорія.

§112. γ -випромінювання ядер. Тривалість життя збудженого ядра. Метастабільні стани збудженого ядра.

§113. Ефект Мессбауера.

[3. §7.1-§7.5; 6. §5.1-§5.6; 9. §3.1-§3.6]

§108. Загальні закономірності радіоактивного розпаду ядер. Рівняння стану вікової рівноваги

Експериментальні дослідження показали, що число розпадів dn за деякий короткий час dt пропорційне до числа ядер даного

радіоактивного ізоотопу n протягом якого ведуться дослідження

$$dn = -\lambda n dt;$$

$$\Delta n_1 = -\lambda_1 n \Delta t_1;$$

$$n = -\lambda_2 n_2 \Delta t_2,$$

де $n_1, n_2, \dots$ - малі числа; λ - ймовірність розпаду ядер (поодиноких) протягом однієї секунди, λ має розмірність с^{-1} або $\frac{1}{\text{с}}$.

Вступають у дію статистичні закономірності

$$dn = -\lambda n dt.$$

Розділивши змінні і проінтегрувавши, отримаємо:

$$\frac{dn}{n} = -\lambda dt;$$

$$\ln n = -\lambda t + C.$$

В момент $t = 0$, $n = n_0$ (початковий момент)

$$n = n_0 e^{-\lambda t},$$

де λ - сталої радіоактивного розпаду ($\lambda = \frac{\ln 2}{\tau}$); τ - період піврозпаду.

Основний закон радіоактивного розпаду показує як міняється число атомів радіоактивного ізоотопу з часом (рис. 97). Величину λ - сталої радіоактивного розпаду та τ - період піврозпаду можна знайти з таблиці.

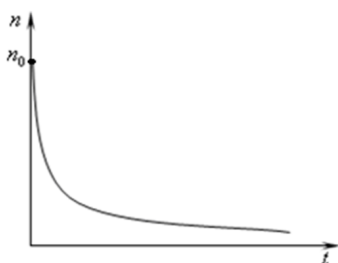
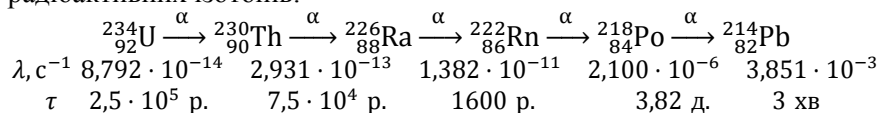


Рис. 97

Значення λ і τ для деяких радіоактивних ізоотопів:



р. - роки;

д. - доби;

хв - хвилини.

Значно можна полегшити визначення λ і τ , якщо скористатися рівнянням вікової рівноваги. Прикладом може бути Ra і Rn. Зокрема, Ra виступає як материнський ізоотоп, а Rn як дочірній ізоотоп. Позначимо $n_1 \rightarrow \text{Ra}$; $n_2 \rightarrow \text{Rn}$, де n_1 і n_2 - число атомів в будь-який момент часу.

В початковий момент часу:

$$n_{10}; n_{20} = 0.$$

В будь-який момент часу:

$$dn_2 = -\lambda_2 n_2 dt + \lambda_1 n_1 dt; \rightarrow \frac{dn_2}{dt} + \lambda_2 n_2 = \lambda_1 n_1;$$

$$n_1 = n_{10} e^{-\lambda_1 t}; \rightarrow \frac{dn_2}{dt} + \lambda_2 n_2 = \lambda_1 n_{10} e^{-\lambda_1 t}.$$

Для подальшого розв'язку попереднього виразу скористаємося функцією приведеною у довіднику з математики для інженерів і учнів (1986 р. випуску), авторами якого є І.Н. Бронштейн, К.А. Семендяєв

$$y' + P(x) = Q(x);$$

$$y = \left(\int dx Q e^{\int P dx} + C \right) e^{-\int P dx}.$$

Тоді

$$n_2 = \frac{\lambda_1 n_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (1 - e^{-(\lambda_2 - \lambda_1)t}).$$

Якщо $t \rightarrow \infty$, то зрозуміло, що цей вираз з показником прямує до 0. Якщо $\lambda_1 \ll \lambda_2$, тоді в знаменнику даного виразу λ_1 знехтуємо і отримаємо

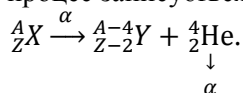
$$n_1 \lambda_1 = n_2 \lambda_2.$$

Ця умова відповідає рівноважному стану. Тобто на скільки зменшується число розпадів дочірнього ядра на стільки збільшується число розпадів за рахунок материнського і настає *стан вікової рівноваги*.

Це поняття є важливим для розуміння кінетики радіоактивного розпаду та для прогнозування стабільності радіоактивних матеріалів. Коли система досягає стану вікової рівноваги, швидкість розпаду відповідного радіоактивного ізотопу стає сталою. Це може бути використано для розрахунку часу піврозпаду, який важливий для багатьох дослідницьких, промислових і медичних застосувань радіоактивних матеріалів.

§109. α -радіоактивний розпад. Експериментальні особливості α -розпаду

Серед частинок, які викидають радіоактивні ядра є α - і β -частинки. α -частинки - це ядра ізотопу ${}^4_2\text{He}$, а пізніше це було і обґрунтовано. Під час α -розпаду маса ядра зменшується на 4 а.о.м., а заряд - на 2 одиниці. Цей процес записується так:



α -частинки переносять високу енергію і її можна оцінити. Енергія α -частинки в магнітних спектрометрах може бути оцінена з

точністю 0,05%.

Можна також використати іонізаційну камеру, яка подібна до лічильника Гейгера-Мюллера. Вона має свої переваги та недоліки:

- *переваги*: 1) швидко дає енергію α -частинки; 2) дає можливість визначити поодинокі α -частинки;

- *недолік*: мала точність, похибка 1-5%.

Розглянемо закономірності α -розпаду:

1. Енергетичний спектр α -частинок у всіх природних ізотопах виявляється вузькими:

$$4 \text{ MeV} \leq T_{\alpha} \leq 9 \text{ MeV}.$$

Середнє значення енергії 6 MeV.

2. Наступна закономірність була встановлена в 1911 році Гейгером і Неттолом та був сформульований закон Гейгера-Неттола. Він дає енергетичний вираз, в якому пов'язується період піврозпаду τ з кінетичною енергією T_{α} α -частинки для всіх природних ізотопів:

$$\lg \tau + a \lg T_{\alpha} = b;$$
$$\tau = \frac{\ln 2}{\lambda},$$

де a і b - сталі для всіх природних елементів.

3. Природні α -радіоактивні елементи бувають числом $Z \geq 82$, єдиний випадок - самарій ${}^{148}_{62}\text{Sm}$, з періодом піврозпаду $\tau = 1,4 \cdot 10^{11} \text{p}$.

Штучні α -радіоактивні ізотопи не входять в цю закономірність, вони можуть мати $Z \leq 82$.

4. α -радіоактивний розпад можливий, якщо маса вихідного (материнського) ядра перевищує сумарну масу продуктів розпаду (маса дочірнього ядра і α -частинки).

5. Енергія (W_{α}) α -розпаду йде на надання кінетичної енергії α -частинці і на збудження дочірнього ядра. В результаті якого відбувається γ -випромінювання ядер

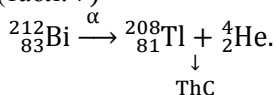
$$T_{\alpha} = \Delta W_{\alpha} \frac{M_{\text{д}}}{M_{\text{д}} + M_{\alpha}} = \frac{\Delta W_{\alpha}}{1 + \frac{M_{\alpha}}{M_{\text{д}}}},$$

де $M_{\text{д}}$ - маса дочірнього ядра.

Основна енергія α -розпаду передається α -частинці. Дослідження, які проводилися за допомогою досконалої апаратури показали, що енергетичний спектр α -частинок, які вилітають з конкретного радіоактивного ізотопу є дискретним. Він має тонкий

характер. Така структура спектру характеризується тією особливістю, що значення компонентів цього спектру досить близькі між собою.

Наприклад, розглянемо енергетичний спектр α -радіоактивного ізотопу Бісмуту ($^{212}_{83}\text{Bi}$) (табл. 7)



Таблиця 7

NN	T_{α}, MeB
α_1	6,086
α_2	6,047
α_3	5,765
α_4	5,622
α_5	5,603
α_6	5,481

Також можна розглянути графічне представлення енергетичного спектру $^{212}_{83}\text{Bi}$ у вигляді наступної діаграми (рис. 98).

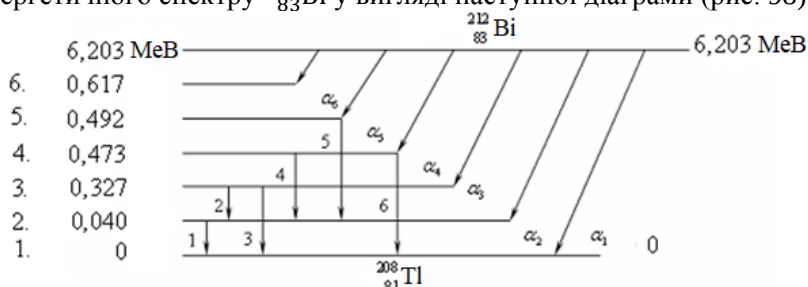


Рис. 98

На основі експериментальних досліджень було виявлено наступні закономірності випромінювання (табл. 8):

Таблиця 8

W_{γ}, MeB	Перехід
1. 0,040	2 $\rightarrow$ 1
2. 0,287	3 $\rightarrow$ 2
3. 0,327	3 $\rightarrow$ 1
4. 0,433	4 $\rightarrow$ 2
5. 0,452	5 $\rightarrow$ 2
6. 0,473	4 $\rightarrow$ 1

Пізніші дослідження показали, що будь-яке складне ядро атома може перебувати в будь-яких дискретних енергетичних станах, тобто енергія збудженого ядра атома квантується. Це зумовлено дискретними станами енергії ядра атома.

§110. Теорія α -радіоактивного розпаду. Визначення радіуса ядра на її основі

На сучасному етапі розвитку ядерної фізики встановлено, що навколо ядра біля атома існує високий електронний потенціальний бар'єр, а в середині глибока потенціальна яма. В середині ядра енергія від'ємна. На графіку (рис. 99) зображено криву для незаряджених частинок.

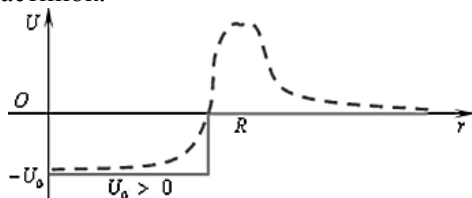


Рис. 99

А на графіку (рис. 100) зображено криву для заряджених частинок.

В масивних ядрах формуються гелієві групи (2 протони, 2 нейтрони). Виходячи з квантових властивостей частинка з енергією U_α може здолати потенціальний бар'єр висотою значно більшою цієї енергії

$$\omega = e^{-\frac{\alpha}{\hbar} \int_R^{r_0} \sqrt{2M_e(U(r) - U_\alpha)} dr},$$

де M_e - ефективна маса частинки.

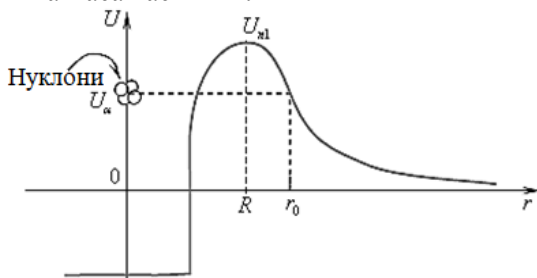


Рис. 100

Ефективну масу частинки можна знайти за формулою:

$$M_e = \frac{M_\alpha M_d}{M_\alpha + M_d} \approx M_\alpha.$$

За секунду ця частинка буде наближатися зі швидкістю

$$v = \nu R.$$

Перетворимо вираз

$$\nu = \frac{v}{R}.$$

Домножимо чисельник і знаменник останнього виразу на M_α

$$\nu = \frac{M_\alpha v}{M_\alpha R} = \frac{p_\alpha}{M_\alpha R}.$$

Приймемо $M_\alpha v$, як імпульс на основі класичних формул. На основі формули де Бройля

$$\lambda_B = \frac{\hbar}{p}.$$

Тоді частота, з якою здійснюються способи проникнути α -частинкам через бар'єр:

$$\nu = \frac{\hbar}{M_\alpha \lambda_B R},$$

де R - радіус ядра.

Прийнявши

$$\lambda_B \approx R,$$

отримаємо

$$\nu = \frac{\hbar}{M_\alpha R^2}.$$

З другого боку ймовірність просочення частинки через потенціальний бар'єр повинна бути рівна сталі радіоактивного розпаду:

$$\lambda = \omega \nu.$$

Підставимо ці значення, отримаємо формулу:

$$\lambda = \frac{\hbar \omega}{M_\alpha R^2};$$

$$\omega = D = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_0} \sqrt{2M_0(U(r) - U_\alpha)} dr},$$

де U_α - енергія, якою характеризується α -частинка в ядрі і яку вона має.

Вираз для внутрішньої енергії

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r},$$

де $U(r) \rightarrow T_\alpha$ для $r = r_0$.

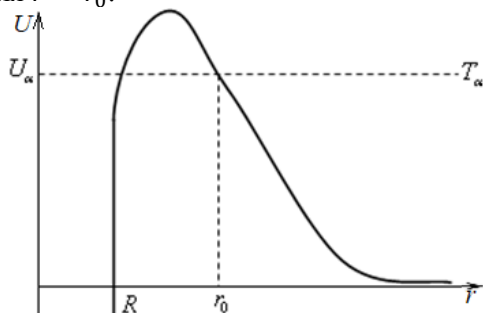


Рис. 101

Існує глибока яма в межах ядра (рис. 101), тобто навколо ядра існує для частинок високий потенціальний бар'єр.

§111. β -радіоактивний розпад і його теорія

Було досліджено, що під час β -розпаду змінюється заряд материнського ядра: коли викидається електрон, заряд збільшується на 1, якщо позитрон - зменшується на 1. Дочірнє ядро залишається незмінним.

Виявлено три типи β -радіоактивного розпаду ядер:

- 1) β^- -розпад (ядра викидають електрони);
- 2) β^+ -розпад (ядра викидають позитрони);
- 3) захоплення ядром одного із електронів власної електронної оболонки.

Пролітаючи поблизу ядра, електрон може бути захоплений ядром.

Якщо електрон захоплюється з K оболонки, то це буде K -захоплення.

Воно відбувається найчастіше, так як ця оболонка найближче знаходиться до ядра (рис. 102). Також бувають L та N захоплення.

Якщо електрон попаде в ядро, то заряд ядра зменшується.

1-й тип: β^- -розпад:

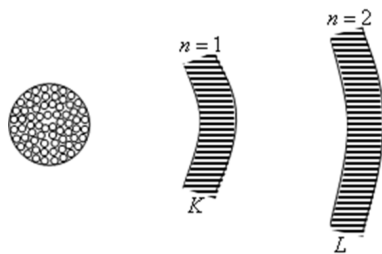
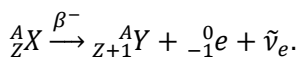
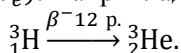


Рис. 102



Виявляється, що тоді викидається нова частинка, яку називають *антинейтрино* ($\tilde{\nu}_e$). Наприклад,



Модельне представлення (рис. 103).

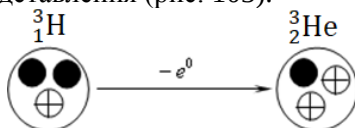
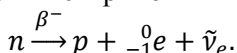
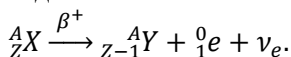


Рис. 103

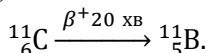
Один із нейтронів ядра перетворюється на протон з вивільнення електрона і антинейтрино



2-й тип: β^+ -розпад: перетворення, які приводять до появи в ядрі позитрона, який викидається на зовні:



У цьому випадку викидається нова частинка, яку називають *нейтрино* (ν_e). Наприклад,



Модельне представлення (рис. 104).

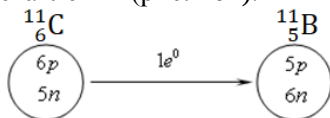
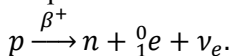
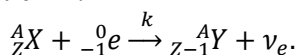


Рис. 104

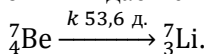
Один із протонів ядра перетворюється на нейтрон з вивільнення позитрона і нейтрино



3-й тип: K -захоплення:



У цьому випадку також викидається *нейтрино* (ν_e). Наприклад,



Модельне представлення (рис. 105).

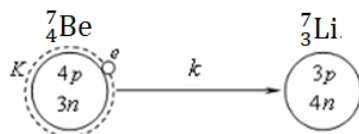
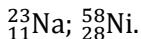


Рис. 105

Виявляється, що є ряд β -радіоактивних ізотопів, які одночасно зазнають β^+ і β^- -розпадів. Такими є:



Є й такі, для яких відбуваються всі три типи розпаду $^{40}_{19}\text{K}$ (рис. 106).

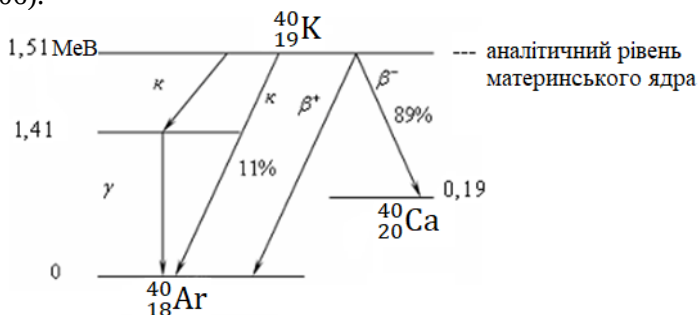


Рис. 106

Теоретичні дослідження в 30-х роках минулого століття зазнали деяких невдач.

Так як інтерпретація неперервного характеру енергії спектра електронів β -розпаду у свій час викликала дуже великі труднощі. На рисунку 107 представлений β -спектр, тобто розподіл β -частинок за енергіями $N_e(T_\beta)$.

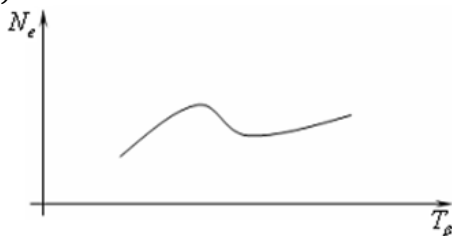


Рис. 107

Здавалося, що подібно α -розпаду, під час якого α -частинки, що

випускаються мають цілком певну енергію, β -розпад також повинен приводити до випускання монохроматичних електронів, енергія яких, відповідає співвідношенню

$$M(A, Z) > M(A, Z + 1) + m_e,$$

буде визначатися енергетичними станами вихідного і кінцевого ядра атома:

$$T_e = \Delta T_\beta = T_1 - T_2 - m_e c^2.$$

В 1931 році було теоретично відкрито та доведено нейтрино швейцарським фізиком Паулі. А ім'я йому дав італійський фізик Фермі. «Нейтрино» по-італійськи означає «маленький нейтральний», ймовірно, по-нашому можна було б сказати «нейтральненький».

В 1956 році було відкрито експериментально нейтрино американськими вченими (Клайд Кован, Фредерік Рейнз, Ф.Б. Гаррісон, Г.В. Крузе та А.Д. МакГваєр) дуже чутливими установками.

Аналіз треків руху протона і β -частинки у розпаді нейтрона показує, що їх треки утворюють деякий кут (рис. 108). Якщо вважати, що нейтрон до розпаду перебуває у спокої відносно спостерігача, то його імпульс дорівнює нулю. Тоді на основі закону збереження імпульсу під час розпаду нейтрона на протон і електрон ці частинки мають рухатись у діаметрально протилежних напрямках, проте цього не спостерігається. За цією схемою порушився закон збереження імпульсу. Отже, у β -розпаді, на перший погляд, не виконуються закони збереження енергії й імпульсу.

Введення гіпотетичної частинки нейтрино давало можливість пояснити закон збереження енергії й імпульсу в процесах β -розпаду. Основна ідея Е. Фермі полягає в тому, що β -частинки і нейтрино не існують в атомних ядрах, подібно до того як фотон не є складовою частиною атома, а з'являється в процесі випромінювання.

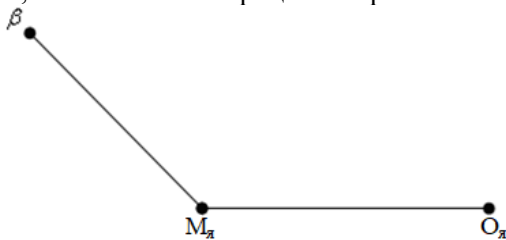


Рис. 108

Експериментальна перевірка t -інваріантності (постійності)

була зроблена в досліді зі зміною потрійної кореляції в β -розпаді нейтрона. Якщо поставити дослід так, щоб трійка векторів $\vec{p}_n$, $\vec{p}_e$ і $\vec{p}_{\bar{\nu}}$ була взаємно перпендикулярна, то під час заміни $t \rightarrow -t$ вони перетворюються в дзеркальну трійку, яка (якщо її повернути на 180° відносно $\vec{p}_n$) відрізняється від початкового тільки орієнтацією спіну s_n (рис. 109). Таким чином, за наявності t -інваріантності повинна бути симетрія випускання e і $\bar{\nu}$ відносно зміни напрямку спіну нейтрона. Іншими словами, в гамільтоніані слабкої взаємодії не повинно бути члена з потрійним змішаним добутком виду $\psi s_n [\vec{p}_e \vec{p}_{\bar{\nu}}]$, тобто коефіцієнт ψ повинен дорівнювати нулю.

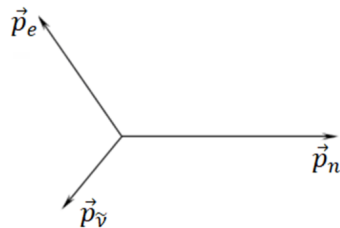


Рис. 109

Геометрія приладу така (рис. 110), що вона відбирає події, для яких $\vec{p}_n$, $\vec{p}_e$, $\vec{p}_p$ і $\vec{p}_{\bar{\nu}}$ лежать в одній площині.

Тоді s_n буде перпендикулярний до цієї площини, а векторний добуток $[\vec{p}_e \vec{p}_{\bar{\nu}}]$ - паралельний або антипаралельний s_n . Тоді за повертання s_n потрійний змішаний добуток $s_n [\vec{p}_e \vec{p}_{\bar{\nu}}]$ повинен поміняти свій знак. Різниця в результатах вимірювання, що виконанні для двох орієнтацій спіну нейтрона, дозволяють оцінити функцію ψ (на парність та непарність).

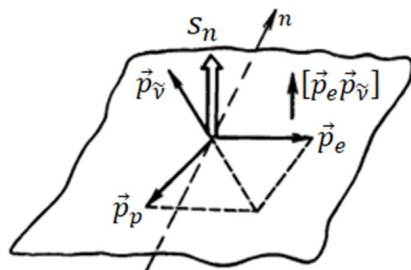


Рис. 110

Дослідимо функцію на парність та непарність. Для цього запишемо вираз ймовірності перебування частинки у деякому об'ємі, тобто ймовірність перебування частинки:

$$\omega = \int_V |\psi(x, y, z)|^2 dV.$$

Відомо, що ймовірність ω перебування деякої частинки в об'ємі визначається за цим інтегралом. Очевидно, що стан перебування частинки в деякому об'ємі не залежить від вибору

координат

$$\omega = \int |\psi(-x, -y, -z)|^2 dV;$$

$$|\psi(x, y, z)|^2 = |\psi(-x, -y, -z)|^2.$$

В зв'язку з тим, що ця функція є комплексною функцією, то

$$\psi(-x, -y, -z) = e^{i\alpha} \psi(x, y, z) \quad |e^{i\alpha};$$

$$\psi(x, y, z) = e^{i\alpha} \psi(-x, -y, -z),$$

де $e^{i\alpha}$ - фазовий множник.

Домножимо верхнє рівняння на $e^{i\alpha}$, маємо

$$e^{i\alpha} \psi(-x, -y, -z) = e^{2i\alpha} \psi(x, y, z).$$

$$\psi(x, y, z)$$

Ми прийшли до висновку, що $e^{2i\alpha} = 1$. Фазовий множник $e^{2i\alpha} = \pm 1$. За зміни координатних осей на зворотні ми можемо очікувати, що функція ψ залишається незмінною або поміняти свій знак. Якщо за зміни координат на дзеркальні, оператор $P = 1$, то функція є *парною*, а якщо для дзеркальної зміни міняє свій знак, то така функція є *непарною*.

Виявилося, що в ядерних процесах був стійким закон, який одержав назву *парності процесів*.

Виберемо функцію ψ парною. Виявимо, чи за час $\psi(t + \tau)$ вона буде парною. Розкладемо в ряд Маклорена за малими степенями:

$$\psi(t + \tau) = \psi(t) + \frac{\hbar\psi}{\partial t} \tau + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \tau^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} \tau^3 + \dots;$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi;$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi;$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r).$$

Парність оператора Гамільтона залежить від двох доданків:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2};$$

$$\frac{\partial}{\partial(-x)} \cdot \frac{\partial}{\partial(-x)} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x}.$$

Отже, добуток функцій (ψ) парний, то $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ також буде парним і навпаки.

§112. γ -випромінювання ядер. Тривалість життя збудженого ядра. Метастабільні стани збудженого ядра

γ -випромінювання можливе у ядерних процесах, під час взаємодії елементарних частинок з ядром у випадку, коли відбувається збудження ядер, тоді вони набувають енергію. Ядро сильно збуджуючись викидає γ -квант випромінювальної енергії. Якщо для β і α радіоактивних розпадів енергія γ -фотонів лежить в межах $W_\gamma \leq 2,5$ MeV, то в ядерних перетвореннях енергія порядку 10 MeV. Коли енергія 15 – 20 MeV, то вилітає γ -квант енергії. γ -кванти, які залишають свої ядра під час переходу їх із вищого енергетичного стану в нижчий міняють кінетичний момент (момент кількості руху) так, що орбітальне квантове число може змінюватись:

$$\Delta l = 1, 2, 3, 4, \dots$$

А значить зміна цих моментів приводить до зміни γ -квантів. Ядро може набувати різних форм від його збудженого стану - це було доведено на основі довгих експериментальних досліджень. Було показано, що в залежності від того, яку енергію переносять γ -кванти, тривалість життя ядра може змінюватися в надзвичайно широких межах. Ядра можуть перебувати в метастабільних енергетичних збуджених станах. Цей експериментальний факт можна представити таблицею 9.

Таблиця 9

Метастабільні стани збуджених ядер

Δl	Енергія γ -фотонів W_γ , MeV	
	0,25	2,5
	Час життя τ , с	
2	10^{-10}	10^{-12}
3	10^{-6}	10^{-10}
4	10^{-2}	10^{-8}
5	10^2	10^{-6}
6	10^6	10^{-4}
7	10^{10}	10^{-4}

Ядро набуває стану електричного диполя надзвичайно часто. Боте і Вайцзекер незалежно один від одного вивели формулу для оцінки життя часу ядер, тобто формулу для оцінки метастабільного стану ядер (формула Боте-Вайцзекера).

$$\tau_{\downarrow} = 10^{-14} \left(\frac{\lambda}{2\pi R} \right)^{2(\Delta l - 1)},$$

в с

де λ - довжина хвилі, що відповідає даному γ -кванту; R - радіус ядра.

Причому довжину хвилі та радіус ядра можна обчислити за формулами:

- довжина хвилі:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{W_\gamma},$$

де W_γ - енергія γ -кванта;

- радіус ядра:

$$R = r_0 \sqrt[3]{A},$$

де r_0 - стала; A - масове число ядра.

§113. Ефект Мессбауера

Ефект Мессбауера являється деяким аналогом резонансного випромінювання і поглинання світла речовиною. Нехай повна енергія якогось атома, що випромінює дорівнює 0,1 МеВ. γ -кванти викидаються ядром з енергією 1 МеВ. Очевидно, коли цей γ -квант викидається ядром, то повинно спостерігатися явище віддачі. Таким чином, енергія, яка пов'язана з γ -випромінюванням перерозподілиться між γ -квантом і ядром, так що

$$W = W_\gamma + W_{\text{я}}.$$

Цілком природно, що

$$W_\gamma = W - W_{\text{я}}.$$

Енергія γ -кванта не буде дорівнювати енергії збудження, вона буде меншою.

Ставиться задача, чому для низьких температур це явище спостерігається. Тобто частота γ -кванту зменшується і наступний атом даного елементу вже його поглинути не буде. Мессбауер прийшов до думки, що тут має місце ефект Доплера.

Схема досліду показана на рисунку 111, де літерою Д позначений прилад для фіксування процесу.

Детектор покаже, що γ -промені не поглинаються зразком. Тоді вчений запропонував рухати зразок з деякою швидкістю $\vec{v}$. Тоді зразок і поглинач будуть наблизитися.

Внаслідок ефекту Доплера γ -квант одержить додаткову енергію і можна підібрати таку швидкість $\vec{v}$, що коли γ -квант буде

переносити енергію рівну енергії збудження.

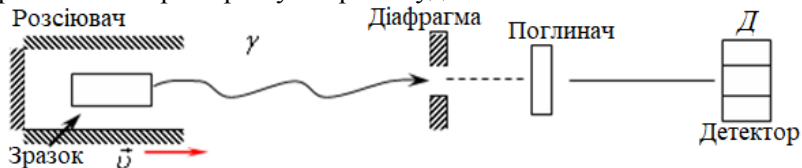


Рис. 111

Виявилось, що

$$M_{\text{я}} = \frac{W_{\text{зб}}^2}{2Mc^2}.$$

З'ясувалося, що лінія випромінювання і лінія поглинання для одного і того ж стану в даному ядрі зсунуті один відносно одного на величину $2W_{\text{я}}$ (рис. 112).

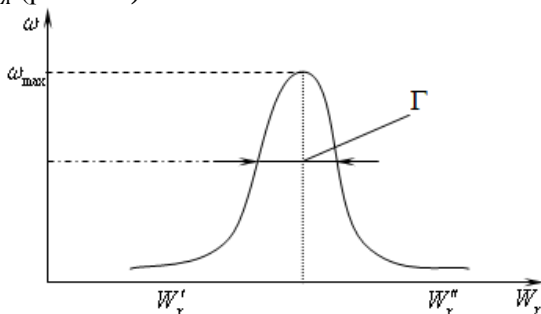


Рис. 112.

Як показали теоретичні дослідження, ця ширина Γ входить в співвідношення Гейзенберга для енергії $\frac{\Gamma}{W_{\gamma}}$ та часу

$$\Gamma \tau \geq h; \rightarrow \Gamma \approx \frac{h}{\tau}.$$

На основі цього співвідношення для ізоотопу ірідію $^{191}_{77}\text{Ir}$ виявлено, що енергія збудження складає $W_{\gamma} \approx 129 \text{ кеВ}$ і час життя $\tau = 5 \cdot 10^{-10} \text{ еВ}$, $\Gamma_{\text{Ir}} \approx 6,6 \cdot 10^{-6} \text{ еВ}$, то для нашого випадку $\frac{\Gamma}{W_{\gamma}} = 5,1 \cdot 10^{-11}$.

Мессбауер показав, що резонансне поглинання можливе якщо $W_{\text{я}} < \Gamma$

$$\Gamma = \frac{h}{\tau},$$

де τ - час життя даного ядра в збудженому стані з енергією W .

Наприклад,

$${}^{57}_{26}\text{Fe}; \quad W_{136} = 14 \text{ кеВ},$$

час життя

$$\tau = 10^{-7} \text{ с},$$

$$\Gamma = \frac{h}{\tau} \approx 10^{-8} \text{ еВ},$$

$$W_{\text{я}} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ еВ}.$$

Отже, $W_{\text{я}} < \Gamma$ - умова не виконується і тому не буде поглинання γ -кванту. Коли надати швидкість для зразка:

$$v = \frac{c\Gamma}{W_{\text{я}}},$$

$$v = 1,3 \cdot 10^{-4} \text{ м/с},$$

то тоді повинно з'явитись явище резонансного поглинання (ефект Мессбауера). Графічна залежність цього процесу має вигляд (див. рис. 113).

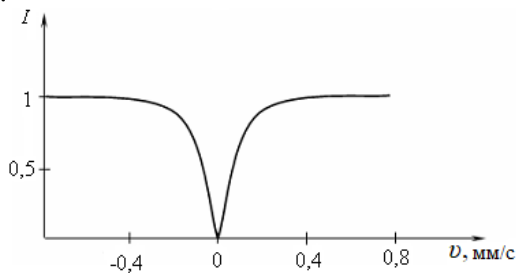


Рис. 113

Де горизонтальна пряма - поглинання не буде, детектор фіксує якесь максимальна значення. Виявилось, що ці пікові мінімуми можуть зникати в залежності від температури, тиску полів та інших факторів, які діють на зразок. Для $v = 0$ спектральні лінії випускання і поглинання збігались і відбувалось резонансне поглинання γ -квантів. Внаслідок цього швидкість підрахунку γ -квантів різко зменшувались.

Ефект Мессбауера на практиці застосовується надзвичайно широко, оскільки дає змогу вимірювати досить малі енергії. Мірою точності цього методу є відношення ширини кожного збудженого ядерного рівня до його величини, тобто $\frac{\Gamma}{h\nu_0}$. Ця величина досягає значень $10^{-15} - 10^{-17}$. Методи вимірювань, в основу яких покладено

ефект Мессбауера, є унікальними. Саме тому його використано для перевірки виконання закону збереження енергії у процесах мікрофізики.

Цей ефект також дав змогу:

- підтвердити висновки загальної теорії відносності про залежність частоти квантів від гравітаційного поля;
- одержати додаткові відомості про коливання кристалічної ґратки;
- вимірювати електричні і магнітні моменти збуджених ядер;
- досліджувати вплив хімічного складу на енергію ядерних рівнів;
- проводити геофізичну розвідку;
- виявити вплив електронних шарів атомів на процеси, що відбуваються всередині атомних ядер;
- застосовувати методи мессбауерівської спектроскопії в дослідженнях з фізики твердого тіла.

Лекція 33. ЯДЕРНІ СИЛИ

§114. Основні характеристики ядерних сил.

§115. Елементарна теорія дейтрона.

§116. Нуклон. Нуклонні взаємодії та визначення радіуса дії ядерних сил.

§117. Обмінний характер ядерних сил.

[3. §2.1-§2.4, §3.1-§3.8; 5. §1.2-§1.8; 6. §2.2, §2.3, §2.6; 9. §4.1-§4.4; 7. §6]

§114. Основні характеристики ядерних сил

Незважаючи на те, що теорія ядерних сил досі недостатньо розроблена, основні властивості ядерних сил досить добре вивчені експериментально. Тому одним із центральних завдань ядерної фізики є з'ясування природи ядерних сил. Ядерні сили неможна віднести ні до одного із двох відомих видів сил. Вони не можуть бути силами електромагнітного походження: електричними через те, що проявляються не тільки між зарядженими частинками, але і між нейтральними частинками (наприклад, між нейтроном і протоном в дейтроні); магнітними через те, що чисто магнітна взаємодія між магнітними моментами нуклонів дуже мала. Сили, що відповідають

за β -розпад і гравітаційні сили, також не можуть бути причиною ядерної взаємодії, так як ті й інші надзвичайно слабкі. Окрім того, сили тяжіння є далекодіючими.

Таким чином, ядерна взаємодія викликається силами, відмінними від усіх відомих сил, - *ядерними силами*. Тобто *ядерними* називають сили, що діють між нуклонами.

Розглянемо основні характеристики ядерних сил.

1. Ядерні сили - це сили притягання. Тоді можна вважати, що ядерні сили діють лише на дуже малій відстані. Для цих сил приписується від'ємна енергія, вона характеризується потенціальною ямою. За допомогою графіка рисунку 114 (де $U_0 > 0$ - позитивна величина) можна оцінити потенціальну енергію $U(r)$ для системи протон-нейтрон.

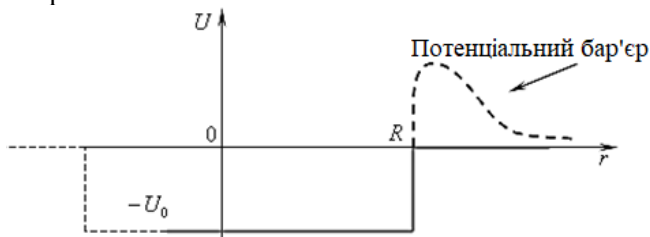


Рис. 114

Нехай є протон, що закріплений у початку координат, і до нього наближається нейтрон. Кулонівське відштовхування в даному випадку відсутнє, і енергія взаємодії n і p , які розташовані на відстані r , що перевищує радіус дії ядерних сил R , дорівнює нулю. За подальшого наближення n і p до відстані, що дорівнює радіусу дії ядерних сил R , між нуклонами виникає ядерна взаємодія, потенціальна енергія різко спадає (рис. 114), утворюючи яму. Застосовуючи методи квантової механіки знаходять вираз для розрахунку потенціальної енергії системи.

2. Ядерні сили є короткодійними про це свідчать і експериментальні дані (досліди Резерфорда), а також теоретичні дослідження Юкави щодо визначення радіусу дії ядерних сил

$$a = \sqrt[3]{\frac{V}{A}},$$

де V - об'єм ядра, A - масове число.

Підставивши значення об'єму, отримаємо

$$a = \sqrt[3]{\frac{V}{A}} = \sqrt[3]{\frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{A}} = \sqrt[3]{\frac{\frac{4}{3}\pi(r_0\sqrt[3]{A})^3}{A}},$$

$$a = r_0 \sqrt[3]{\frac{4}{3}\pi},$$

$$a = 2,3 \cdot 10^{-15} \text{ м.}$$

Число a ми одержали на основі теорії Юкави в §102.

3. Ядерні взаємодії найсильніші серед всіх відомих сил природи, вони значно перевищують сили електромагнітної взаємодії. Вираз для потенціальної енергії взаємодії для двох протонів (рис. 115) має вигляд:

Два протони



Рис. 115

$$U_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2R}.$$

Підставивши відповідні значення у попередню формулу, знайдемо

$$U_e \approx 0,6 \text{ МеВ.}$$

Ядерні сили сильніші від електромагнітних приблизно в 2000 разів.

4. Ядерні сили характеризуються властивістю насичення. Якщо питома енергія зв'язку стала, то цей факт свідчить про те, що ядерні сили є силами насичення.

Штрихованою лінією на рисунку 116 показана координатна сфера. Перша сфера буде зазнавати дію ядра 1. Наприклад, нуклони 3, 5, 9, 7 вони не можуть взаємодіяти з нуклоном 1. Вони взаємодіють відповідно: $3 \rightarrow 2$; $7 \rightarrow 6$; $4 \rightarrow 5$; $9 \rightarrow 8$. Це і є прояв насиченості, зміст якої полягає в тому, що взаємодія відбувається лише між найближчими нуклонами. А отже, відбувається насичення ядерних сил.

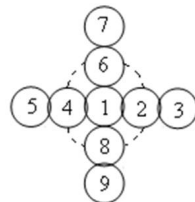


Рис. 116

На рисунку 117 представлено графік залежності питомої енергії зв'язку від кількості нуклонів в ядрі.

Ядерні сили є короткодіючі, вони діють в межах 1 нуклона.

5. Є ряд доказів, що ядерні сили характеризуються спіном, тобто залежністю від орієнтації у просторі станів взаємодіючих частинок. Підтвердження цього є те, що в природі існують ядра важкого водню з спінами, які зорієнтовані паралельно. З

паралельними спінами дейтронів в природі не існує.

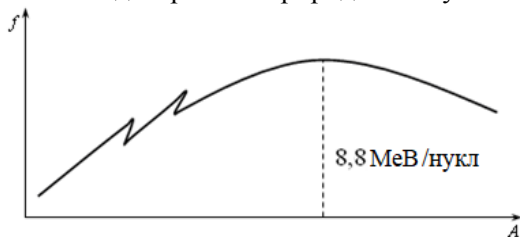


Рис. 117

На рисунку 118 показано орієнтацію спінів нейтрона та протона.

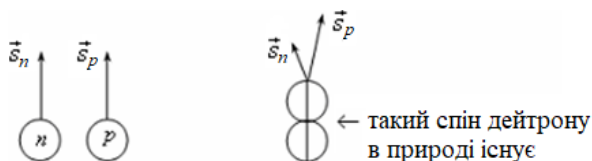


Рис. 118

В природі існує ортоводень з паралельними спіновими моментами і пароводень антипаралельними спіновими моментами. Ці факти свідчать про те, що ядерні взаємодії мають спіновий характер - залежність від орієнтації спінів.

6. Експериментальні данні свідчать, що між нуклонами існують спін-орбітальні взаємодії. Між орбітальним і механічним спіновим моментами існує взаємозв'язок. Це явище спостерігається в діаманетиках.

7. Ядерні взаємодії згідно теорії Юкави (між нуклонами) відбуваються внаслідок обміну мезонами. Нуклон оточений хмаркою π -мезонів і за певних умов нуклони обмінюються ними. Факт обміну π -мезонами свідчить про складну структуру мезона. У сучасній ядерній фізиці описано ряд експериментів щодо цього.

§115. Елементарна теорія дейтрона

Перші теоретичні способи побудувати теорію ядра реалізувалися під час вивчення дейтрона. Дейтрон (${}^2_1\text{H}$) - це найпростіше складне ядро, що містить один протон і один нейтрон. Нагадаємо його основні властивості.

Енергія зв'язку дейтрона дуже мала: $W_{\text{зв}} = 2,22 \text{ MeB}$.

Очевидно, що вона співпадає з енергією відокремлення протона (W_p) і нейтрона (W_n) від ядра дейтрона. Спін дейтрона дорівнює 1.

Дейтрон може перебувати у вигляді електричного диполя і у вигляді квадрополя. Він характеризується деяким магнітним моментом. Більше 60% часу ядро дейтерію перебуває в s -стані (квантовий момент дорівнює нулеві). Для опису стану ядра використовується рівняння Шредінгера. Якщо потенціальна енергія залежить від відстані ($U(r)$), то внаслідок динамічних процесів проявляються відцентрові ефекти. Величина енергії відцентрових сил представляється формулою:

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_0 r^2}.$$

Повна потенціальна енергія повинна включати наступні доданки:

$$-U(r) = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_0 r^2},$$

де M_0 - зведена маса.

Для зведеної маси маємо:

$$M_0 = \frac{M_p M_n}{M_p + M_n}.$$

Виходячи з того, що

$$M_p \approx M_n = M.$$

Тоді $M_0 = \frac{1}{2} M$.

У випадку, коли розглядаємо s - стан дейтрона $l = 0$ і цей другий доданок відповідно до рівняння Шредінгера, запишеться так:

$$\left(\nabla^2 + \frac{2M_0}{\hbar^2} (W - U(r)) \right) \psi = 0;$$

$$\psi(r, \alpha, \theta) = \varpi(\alpha, \theta) R(r),$$

де ϖ - сферична хвильова функція; R - радіальна хвильова функція.

Рівняння Шредінгера набуде вигляду:

$$\left(\nabla_n^2 + \frac{M_0}{\hbar^2} (W - U(r)) \right) R(r) = 0;$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r};$$

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{M}{\hbar^2} (W - U(r)) R = 0,$$

де W - енергія, яку може набувати узагальнена частинка з масою M , рухаючись в ядрі дейтрона.

Для потенціальної енергії маємо

$$U(r) = U_0 e^{-\frac{r}{a}},$$

$$U(r) = U_0 e^{-\left(\frac{r}{a}\right)^2} - \text{функція Гауса},$$

$$U(r) = U_0 \frac{a}{r} e^{-\frac{r}{a}} - \text{функція Юкави}.$$

Необов'язково потенціальна яма повинна мати прямокутний характер. Результати, які одержуються на основі застосування цих трьох функцій виявились близькими до результатів із застосуванням формули для прямокутної ями.

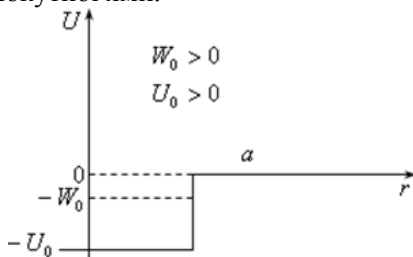


Рис. 119

На рисунку 119 зображено дві області:

1. Область

$$U = -U_0; W = -W_0.$$

2. Область

$$U = 0; W = -W_0;$$

$$pa = \hbar;$$

$$\frac{p^2}{2M_0} = T,$$

де T - кінетична енергія частинки; $2M_0$ - фактична маса нуклона.

За попередньою формулою можна розрахувати кінетичну енергію частинки

$$T \approx 10 \text{ MeV}.$$

Отже, глибина потенціальної ями дейтрона, повинна бути (яка перевищує) 12 MeV.

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \frac{M}{\hbar^2}(W - U(r))R = 0; \quad (115.1)$$

$$R' = \frac{dR}{dr}.$$

Частинна похідна буде відповідати повній

$$\frac{\partial R}{\partial r} = \frac{dR}{dr}.$$

Таким чином, ми отримали рівняння (115.1), яке нам слід розв'язати

$$W = W_{\text{зв}}.$$

Введемо нову змінну

$$U = Rr;$$

$$\frac{dU}{dr} = rR' + R;$$

$$\frac{d^2U}{dr^2} = U'' = rR'' + R' + R' = rR'' + 2R'.$$

Якщо тепер рівняння (115.1) ми домножимо на r , то прийдемо до такої змінної:

$$U'' + \frac{M}{\hbar^2}(W - U)u = 0. \quad (115.2)$$

Враховуючи, що функція H має розрив, то нам прийдеться записати два рівняння:

1. Область

$$U_1'' + \frac{M}{\hbar^2}(U_0 - W_0)U_1 = 0. \quad (115.3)$$

2. Область

$$U_2'' - \frac{M}{\hbar^2}W_0U_2 = 0. \quad (115.4)$$

Введемо позначення:

$$\frac{M}{\hbar^2}(U_0 - W_0) = \alpha^2;$$

$$\frac{M}{\hbar^2}W_0 = \beta^2;$$

$$U_1'' + \alpha^2U_1 = 0;$$

$$U_2'' + \beta^2U_2 = 0;$$

$$U_1 = C_1 \sin \alpha r + C_1' \cos \alpha r \quad U_1 = 0 \text{ для } r = 0 \quad C_1' = 0;$$

$$U_2 = C_2 e^{-\beta r} + C_2' e^{\beta r} \quad U_2 = 0 \text{ для } r = \infty \quad C_2' = 0;$$

$$U_1 = C_1 \sin \alpha r; \quad (115.5)$$

$$U_2 = C_2 e^{-\beta r}. \quad (115.6)$$

На межі двох областей функція змінюється нерозривно і також змінюється її похідна.

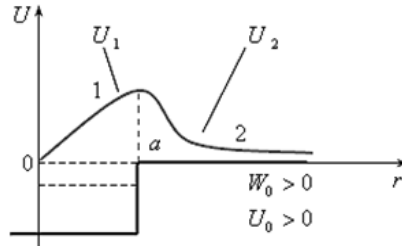


Рис. 120

Як показали теоретичні дослідження, що 40% часу дейтрон перебуває в дисоційованому стані ядра та із його частинками перебуває в другій області. На основі формул (115.5) і (115.6) ми можемо визначити потенціальну енергію U_0 , що є дном потенціальної ями

$$\begin{aligned} U_1|_{r=a} &= U_2|_{r=a}; \\ \frac{dU_1}{dr}\bigg|_r &= \frac{dU_2}{dr}\bigg|_r = a; \\ C_1 \sin \alpha r &= C_2 e^{-\beta r}; \\ C_1 \sin \alpha a &= C_2 e^{-\beta a}. \end{aligned}$$

Візьмемо похідні:

$$\begin{aligned} \alpha C_1 \cos \alpha &= -\beta C_2 e^{-\beta a}; \\ \operatorname{tg} \alpha a &= -\frac{\alpha}{\beta}; \end{aligned}$$

$$(27,9 \leq U_0 \leq 105) \text{ MeV.}$$

Коли ми замість $\frac{\alpha}{\beta}$ підставимо їх значення, то отримаємо:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \left(a \sqrt{\frac{M}{\hbar^2} (U_0 - W_0)} \right) + \sqrt{\frac{U_0}{W_0} - 1} &= 0; \\ a &= 2 \cdot 10^{-15} \text{ м}; \\ W_0 &= 2,22 \text{ MeV.} \end{aligned}$$

Розв'язавши це трансцендентне рівняння, одержимо:

$$U_0 = 5,81 \cdot 10^{-12} \text{ Дж} = 36,7 \text{ MeV.}$$

Відповідно, потенціальна яма дейтрона буде вузькою і її глибина перевищує енергію зв'язку приблизно в 16 разів. Інші форми потенціальних ям з малим радіусом дії дають приблизно ті ж результати, що і прямокутна потенціальна яма.

§116. Нуклон. Нуклонні взаємодії та визначення радіуса дії ядерних сил

Розсіювання, яке ми будемо розглядати має дві особливості:

1. Розсіювання незаряджених частинок на заряджених ($n - p$).
2. Розсіювання заряджених частинок на заряджених ($p - p$).

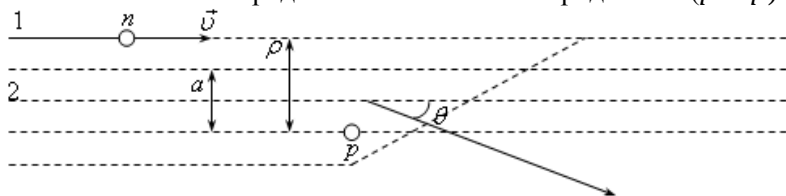


Рис. 121

Де на рисунку 121 ρ - параметр удару; a - радіус дії ядерних сил; v - швидкість руху заряджених частинок (протонів, нейтронів); θ - кут розсіювання.

Параметр удару - це віддаль від розсіювального центра до лінії, вздовж якої повинна рухатись частинка, що зазнає розсіювання. Це одна із важливіших характеристик у дослідженні розсіювання.

1. Дослідження $\rho > a$, розсіювання не буде.
2. Дослідження $\rho < a$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}.$$

Розсіювання $p - p$.

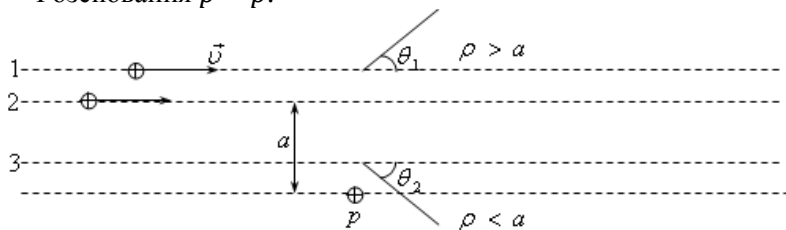


Рис. 122

На рисунку 122 представлено розсіювання двох видів:

1. Чисто електричне.
2. Переважання ядерних сил.

Другим важливим фактом є поява під час розсіювання механічного моменту - кількості руху. Коли частинку випускають з деяким імпульсом p , то rp - це початкова величина механічного моменту

$$\rho p = \hbar \sqrt{l(l+1)},$$

$$\rho = \frac{\hbar}{p} \sqrt{l(l+1)}.$$

Параметр ρ квантується в зв'язку з тим, що l може набути значень $0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ і кути розсіювання теж квантуються.

Величина $\frac{\hbar}{p} = \lambda$ - довжина хвилі де Бройля для нейтронів ($\lambda = \frac{\lambda}{2\pi}$).

$$\rho = \lambda \sqrt{l(l+1)},$$

де $l = 0, 1, 2, \dots$.

Можна використати також і кінетичну енергію

$$p = \sqrt{2mT},$$

$$\rho = \frac{\hbar}{\sqrt{2mT}} \sqrt{l(l+1)}.$$

Якщо $l = 0$, коли частинка перебуває в s -стані, тоді $\rho = 0$, то це відповідає коловому удару.

1. Розсіювання нейтронів на протонах ($n \rightarrow p$).

Збільшуючи кінетичну енергію T ми прийдемо до випадку, коли $l = 1$. А це означає, що розсіювання буде за певними дискретними кутами

$$a = \frac{\hbar}{\sqrt{2mT}},$$

$$a \approx 2 \cdot 10^{-15} \text{ м.}$$

2. Розсіювання протонів на протонах ($p \rightarrow p$).

Цей випадок дає можливість визначити ще більш точно радіус дії ядерних сил a . Мотт знайшов математичний вираз для визначення ефективного перерізу для $p \rightarrow p$

$$d_n = \sigma n \nu N,$$

де $n \nu$ - густина потоку цих частинок, які будуть розсіюватись; N - число розсіюючих центрів; σ - коефіцієнт пропорційності, що визначає число розсіюваних частинок в одиниці часу

$$\sigma = \frac{d_n}{n \nu N},$$

$$[\sigma] = \frac{\text{с}^{-1}}{\text{м}^{-3} \cdot \text{м} \cdot \text{с}^{-1}} = \text{м}^2,$$

де σ - ефективний переріз, тобто сигма (σ), як коефіцієнт визначається в $[\text{м}^2]$.

Отже, ефективним перерізом буде величина σ . З експерименту завжди можна знайти σ (ефективний переріз розсіювання). Тобто σ залежить від енергії розсіюваних частинок. Для ефективного перерізу розсіювання можна записати формулу

$$\sigma = \left(\frac{Z^2 e^2}{T_p} \right) \left\{ \frac{1}{\sin^4 \theta} + \frac{1}{\cos^4 \theta} - \frac{\cos \left[\frac{Z^2 e^2}{\hbar v} \ln \tan^2 \theta \right]}{\sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta} \right\} \cos \theta \Delta \Omega,$$

де θ - кут розсіювання; v - швидкість частинок, які розсіюються; $\Delta \Omega$ - це той тілесний кут, що захоплюється спостерігачем.

Було помічено, що для малих енергій протонів, які розсіюються визначені експериментальні ефективні перерізи дуже точно і співпадають з розрахованими за цією формулою.

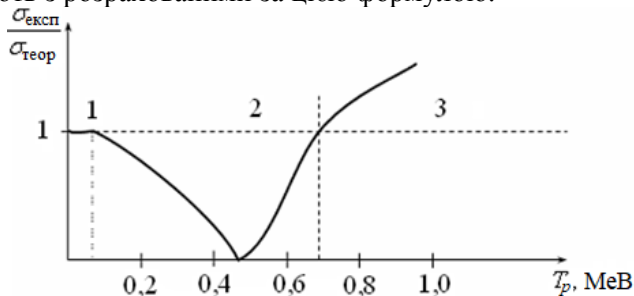


Рис. 123

На рисунку 123 T_p - це енергія протона. Перша область вказує на те, що за малих енергій відбувається електростатична взаємодія. В точці, що відповідає 0,45 MeV відбувається зрівноваження електростатичних і ядерних сил. Далі від 0,45 MeV відбувається перевага ядерних сил, вони переважають аж до кінця другої області. Для теорії має місце точка, де сили електричні і ядерні урівноважуються - це 0,45 MeV, вони взаємоскомпенсуються.

Можна розрахувати, що для протона 0,45 MeV, ця віддаль складає $(2 - 3) \cdot 10^{-15}$ м (радіус дії ядерних сил). Радіус дії ядерних сил будемо вважати приблизно $2 \cdot 10^{-15}$ м.

§117. Обмінний характер ядерних сил

Нуклони мають свою структуру і верхня хмарка, яка оточує ядро нуклона складається з π -мезона. Тому і стверджують, що ядерні сили мають обмінний характер. Між нуклонами відбувається обмін

π -мезонами:

$$\pi^+, \pi^-, \pi^0.$$

Маса заряджених мезонів π^+, π^- складає 273,2 маси електрона ($\pi^\pm \rightarrow 273,2m_e$). Незаряджений π^0 має $264,2m_e$.

Час життя заряджених піонів (мезонів) $2,55 \cdot 10^{-8}$ с, а для π^0 цей час життя $10,8 \cdot 10^{-16}$ с.

π -мезони розкладаються за такими реакціями:

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu,$$

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu,$$

де ν_μ і $\bar{\nu}_\mu$ - нейтрино та антинейтрино μ -оного походження, μ^+, μ^- - плюс і мінус мезони.

$$\begin{aligned} \pi^0 & \begin{cases} \nearrow \gamma \rightarrow e^- + e^+ \\ \searrow \gamma \rightarrow e^- + e^+ \end{cases}; \\ \pi^0 & \rightarrow 2\gamma \rightarrow 2(e^- + e^+); \\ a & = c\Delta t. \end{aligned}$$

1. Сили Майорана.

Вони проявляється між взаємодією протонів і нейтронів у результаті обміну між ними π^+, π^- мезонами. Віддаль між ними менша а. Ядерна реакція може бути описана в такому вигляді:

$$p + n \rightleftharpoons n' + \pi^+ + n \rightleftharpoons n' + p';$$

$$n + p \rightleftharpoons p' + \pi^- + p \rightleftharpoons p' + n'.$$

На першому місці стоїть та частинка, яка зазнає розпаду. Як видно, що у взаємодіях, які підпорядковуються майоранівським силам протон і нейтрон міняються місцями або навпаки $n \rightarrow p$. Таким чином, коли діють сили Майорана, то p і n здійснюють обмін просторовими координатами. Подіємо оператором Майорана на функцію ψ

$$\begin{aligned} \hat{P}_M \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{S}_1, \vec{S}_2) &= \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_1); \\ P_M &= |\hat{P}_M| = (-1)^I. \end{aligned}$$

2. Сили Гейзенберга.

Вони проявляються також як і сили Майорана між нуклонами через π^+ і π^- мезони. Але для сил Гейзенберга має місце зміна не лише просторових, але спінових координат

$$\begin{aligned} \hat{P}_M \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{S}_1, \vec{S}_2) &= \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_1); \\ P_\Gamma &= |\hat{P}_\Gamma| = (-1)^{\ell^2 + s + 1}. \end{aligned}$$

3. Сили Барлета.

Ці сили проявляються в обміні між взаємодіючими нуклонами нейтральними π^0 -мезонами

$$\begin{aligned} p + p &\rightleftharpoons p' + \pi^0 + p \rightleftharpoons p' + p'; \\ n + p &\rightleftharpoons n' + \pi^0 + p \rightleftharpoons n' + p'; \\ n + n &\rightleftharpoons n' + \pi^0 + n \rightleftharpoons n' + n'; \\ p + n &\rightleftharpoons p' + \pi^0 + n \rightleftharpoons p' + n'. \end{aligned}$$

Під час появи сил Барлета заряди нуклонів залишаються незмінними, тобто обміну просторових координат не відбувається, але повинні змінюватись спінові координати

$$\begin{aligned} \hat{P}_B \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{S}_1, \vec{S}_2) &= \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{S}_2, \vec{S}_1); \\ P_B &= (-1)^{s+1}. \end{aligned}$$

4. Якщо обмін між нуклонами не призводить до зміни між просторовими і спіновими координатами (такі взаємодії спостерігаються), то взаємодії, що відбуваються між нуклонами одержали назву *сили Вігнера*.

Лекція 34. МОДЕЛЬ АТОМНИХ ЯДЕР

§118. Краплинна модель ядра. Формула Вайцекера.

§119. Труднощі краплинної моделі. Розповсюдженість ізотопів у метagalacticі. Спін ядра. Магнітні та електричні моменти атомних ядер.

§120. Оболонкова модель ядра.

[3. §1.4-§1.6, §4.2-§4.6; 5. §2.2-§2.9; 6. §1.6, §1.7, §8.1; 9. §5.1-§5.3]

§118. Краплинна модель ядра. Формула Вайцекера

Те, що густина ядерної речовини всіх ядер постійна, говорить про її нестисливість. Ця властивість вказує на схожість ядерної речовини з рідиною. Про таку аналогію свідчить також відмічена пропорційність енергії зв'язку $\Delta W_{\text{зв}}$ до масового числа A , яку можна порівняти з лінійною залежністю енергії випаровування рідини від її маси.

Виходячи із постійності середньої енергії зв'язку $\bar{\epsilon} = \frac{\Delta W_{\text{зв}}}{A}$ властивість насичення ядерних сил поглиблює аналогію, так як подібною властивістю володіють хімічні сили, що зв'язують молекули рідини. Все це дає можливість побудувати краплинну

модель атомного ядра, за якою ядро являє собою кулясту краплину нестисливої зарядженої ядерної рідини. Частини цієї рідини взаємодіють тільки з невеликим числом найближчих частинок.

Тобто ядро розглядалось спочатку як краплинка, наприклад, краплинка води. Ця модель уподібнює ядро до краплинки (рис. 124).

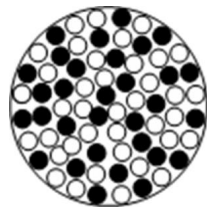


Рис. 124

За цією моделлю приймається, що нуклони рухаються хаотично. Дана модель виявилася зручною, щоб пояснити за яких процесів виникає енергія зв'язку. Дослідженнями енергії зв'язку, виходячи з краплинної моделі, займався Вайцекер, який вивів напівемпіричну формулу.

Він виявив, що енергія зв'язку є не лише енергією ядерної взаємодії, яка існує між нуклонами. Перший компонент енергії той, що є результатом дії між нуклонами; другий - є результатом поверхневого тиску (подібного до поверхневого тиску рідини); третій компонент - це результат нуклонівської взаємодії; четвертий - є результатом тієї тенденції, яка проявляється в ядрах, щоб число протонів і нейтронів було однаковим. За таких умов враховуються особливості взаємодії ядер, до складу яких входить парно-непарне число нуклонів або парно-непарне, непарно-парне чи парно-парне число нуклонів.

Формула Вайцекера містить п'ять компонентів:

$$\begin{aligned}
 & (1) \quad (2) \quad (3) \quad (4) \quad (5) \\
 W_3 = & a_{об}A - a_{пов}A^{\frac{2}{3}} - a_K Z^2 A^{-\frac{1}{2}} - a_{сим} \left(\frac{A}{2} - Z \right)^2 A^{-1} - a_{пр} A^{-\frac{3}{4}} \delta, \quad (118.1) \\
 & a_{об} = 15,75 \text{ MeV}; \quad a_K = 0,71 \text{ MeV}; \\
 & a_{пов} = 17,8 \text{ MeV}; \quad a_{сим} = 23,7 \text{ MeV}; \\
 & a_{пр} = 34,0 \text{ MeV}.
 \end{aligned}$$

Вище зазначалося, що найбільш стійкими є ядра з парними Z , тобто парними знаннями $Z = A - N$. Більш детальний розгляд цього питання показує, що всі ядра можна за їх стійкості поділити на три групи. В першу групу входять найбільш стійкі парно-парні ядра; до другої - менш стійкі парно-непарні і непарно-парні ядра (з непарним масовим числом A) і, на завершення, в третю - непарно-непарні ядра, які, як правило, нестабільні (відомо тільки чотири стабільних ядра такого типу: ${}^2_1\text{H}$, ${}^6_3\text{Li}$, ${}^{10}_5\text{B}$ і ${}^{14}_7\text{N}$). У зв'язку з цим маса атомних ядер з даним парним масовим числом $A = 2n = \text{const}$ для послідовної зміни заряду ядер Z на одиницю (що переводить ядро із першої групи в третю і навпаки) змінюється не плавно, а стрибкоподібно. Такий

характер зміни маси ядер із зміною Z не передбачений формулою (118.1) тоді для парно-парних ядер вона дає завищене значення маси, а для непарно-непарних - занижене. Щоб формула правильно передавала значення мас усіх ядер, у неї необхідно внести ще один доданок δ , що дорівнює:

$$\delta = \begin{cases} -1, & \text{для парно – непарних ядер;} \\ 0, & \text{для непарних ядер;} \\ 1, & \text{для непарно – непарних ядер.} \end{cases}$$

Підводячи підсумок, можна сказати, що краплинна модель дає можливість якісно зрозуміти усереднену залежність енергії зв'язку від A і Z , сферичну (або близьку до сферичної) форму більшості ядер, а також спіни і парності невеликого числа нижчих збуджених рівнів парно-непарних ядер (але не їхньої енергії).

§119. Труднощі краплинної моделі. Розповсюдженість ізотопів у метagalактиці. Спін ядра. Магнітні та електричні моменти атомних ядер

Область застосування тієї або іншої моделі визначається сукупністю факторів, які ця модель здатна пояснити. В кожній моделі, розуміється, є довільні параметри, які необхідно підбирати, тобто «підганяти» під експериментальні дані.

Звичайно, вводячи достатньо багато параметрів, можна пояснити будь-які дані на основі будь якої моделі. Але такі моделі, в яких бідність фізичної ідеї компенсується великим числом параметрів, як правило, добре пояснює відомі факти, але не способи передбачення нових явищ. У цьому випадку найбільш цінними моделями є моделі з мінімальним числом параметрів, що дають можливість робити нетривіальні передбачення хоча б якісного характеру.

Краплинна модель атомного ядра допомогла пояснити багато явищ. З її допомогою вдалося отримати напівемпіричну формулу для енергії зв'язку і маси ядра, пояснити багато особливостей поділу важких ядер і деякі закономірності α -розпаду. Краплинна модель ядра дає можливість побудувати напівкількісну теорію поділу. За допомогою краплинної моделі можна визначити умови, що пов'язують A і Z для всіх β -стабільних ядер. Однак, не дивлячись на ці аналогії, не треба забувати і про принципову відмінність ядерних і молекулярних явищ.

По-перше, сили молекулярної взаємодії за своєю фізичною

природою є силами електромагнітної взаємодії. Ядерні ж сили - це особливий специфічний вид сил, які не зводяться тільки до електромагнітних сил.

По-друге, рух складових частин рідини може бути описаний в рамках класичних уявлень, тоді як рух нуклонів в ядрі має суто квантовий характер.

По-третє, «ядерна рідина» складається із суміші двох «рідин»: протонної і нейтронної.

Краплинна модель не спрацьовує для пояснення магнітних моментів ядра. Виявилось, що окремі ізотопи характеризуються виключно великою енергією ядерного збудження (рис. 125).

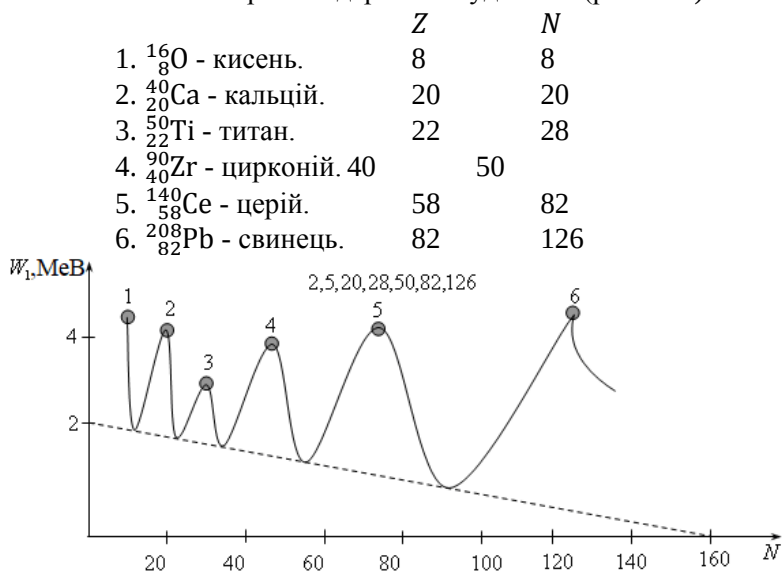


Рис. 125

Ця модель не могла пояснити, чому деякі ізотопи надзвичайно розповсюджені в природі. За одиничний параметр розповсюдження p взято розповсюдженість для $^{40}_{20}\text{Ca}$, тобто

$$p_{\text{Ca}} = 1.$$

З ним порівнюють розповсюдження елементів в зірках та інших об'єктах. Більш розповсюджені ті елементи число нуклонів яких входить в ряд «магічних чисел» (табл. 10). Розповсюдженість і стабільність ядер взаємозв'язані.

Таблиця 10

	Z	N	p
${}^4_2\text{He}$	2	2	10^8
${}^{16}_8\text{O}$	8	8	$9 \cdot 10^2$
${}^{40}_{20}\text{Ca}$	20	20	1
${}^{60}_{28}\text{Ni}$	28	32	10^{-1}
${}^{88}_{38}\text{Sr}$	38	50	10^{-3}
${}^{90}_{40}\text{Zr}$	40	50	10^{-3}
${}^{120}_{50}\text{Sn}$	50	70	$2 \cdot 10^{-4}$
${}^{138}_{56}\text{Ba}$	56	82	$8 \cdot 10^{-4}$
${}^{140}_{58}\text{Ce}$	58	82	10^{-4}
${}^{208}_{82}\text{Pb}$	82	126	$2 \cdot 10^{-4}$

У магічних ядрах кількість протонів і нейтронів складає магічне число. Так значення N і Z , що дорівнює 2, 8, 20, 28, 50, 126 і 152, отримали назву «магічних чисел». Атомні ядра, в яких число протонів або число нейтронів співпадають з одним із таких магічних чисел, зазвичай називають «магічними ядрами». Магічні ядра володіють підвищеною стійкістю, що має різноманітні прояви.

Магнітні моменти ядер зумовлені рухом нуклонів, які мають орбітальні магнітні моменти (протони).

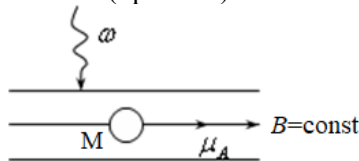


Рис. 126

Ці моменти приходять в прецесійний рух (рис. 126). Вплив змінного поля з частотою ω призведе до коливань ядер

$$\hbar\omega = \mu_A B,$$

де μ_A - магнітний момент, що орієнтується в напрямку поля; $\mu_A B$ - енергія, якої набуває ядро з магнітним моментом μ_A в магнітному полі з індукцією B .

Спрощена формула:

$$j = 1; j = s + l,$$

де j - повне квантове число, яке включає спіновий і орбітальний моменти. Це явище називається *ядерний магнітний резонанс*.

Очевидними недоліками краплинної моделі є бідність спектра збуджень і неможливість дослідження індивідуальних (а не усереднених) властивостей окремих ядер. Істотним недоліком простої краплинної моделі є також її нездатність пояснити великі квадрупольні моменти перших збуджених станів. Тому треба було створити нову модель і нею стала оболонкова модель ядра.

§120. Оболонкова модель ядра

Експеримент і теоретичні дослідження привели до думки, що ядро як квантова система досить складна, у якій нуклони перебувають в складних закономірних рухах. Нуклони рухаються по орбітах навколо центра мас ядра подібно до того як електрони рухаються навколо ядра. Тому представлення про існування оболонок в ядрі, відповідно якому нуклони рухаються в самоузгодженому полі майже незалежно один від одного, протирічать уявленню про ядро як рідку краплину. Тоді не дивно, що ці дві моделі мають різні області застосування. Краплинна модель ядра краще виправдовує себе під час застосування до збуджених станів ядер. Основні стани ядер значно краще описуються моделлю ядерних оболонок. Сучасна форма моделі ядерних оболонок створена в 1948-1949 рр. Авторами цієї моделі є М. Геппере-Майер, О. Гаксель, І. Іенсен і Г. Зюсс.

Модель ядерних оболонок тісно пов'язана з квантовомеханічними уявленнями й описом електронних оболонок атомів. Вводиться головне квантове число n , яке буде відображати рух нуклонів, рівні енергії та характеристики термів сильної спіно-орбітальної взаємодії нуклонів

$$j = l + s.$$

Заповнення рівнів та оболонок нуклонів у ядрі наводиться у таблиці 11.

Таблиця 11

Номер оболонки забудови нуклонів у ядрі n	Рівні енергії	Терми сильної спіно- орбітальної взаємодії	Можливе число частинок на рівні	Можливе число частинок в оболонці	Можливе число частинок у ядрі
1.	$1s$	$1s_{1/2}$	2	2	2
2.	$2p$	$2p_{3/2}$ $2p_{1/2}$	4 2	6	8

3.	$3d$	$3d_{5/2}$	6	12	20
		$3d_{3/2}$	4		
		$3d_{1/2}$	2		
	$2s$	$2s_{1/2}$			

Для того, щоб могли утворюватися замкнуті оболонки нуклонів в атомних ядрах, необхідно дві умови:

1) нуклони підлягають статистиці Фермі-Дірака (принципу Паулі);

2) рух кожного нуклона характеризується орбітальним квантовим числом l .

Перша умова виконується: нуклони є ферміонами і підлягають принципу Паулі.

Виконання другої умови і в наші дні не має строгого теоретичного обґрунтування. Для того, щоб можна було говорити про орбітальні рухи нуклона в ядрі і про орбітальне квантове число, яке характеризує цей рух, довжина вільного пробігу нуклона в ядрі повинна бути рівна з розміром ядра.

Модель ядерних оболонок була успішно застосована для оцінки спінів ядер; для пояснення деяких загальних закономірностей, що спостерігаються в магнітних і електричних квадрупольних моментах ядер; для пояснення властивостей ядер, що знаходяться у низьких збуджених станах; для пояснення появи «островів» ізомерії, що групуються навколо магічних чисел 50, 82 і 126.

У більшості випадків дослідний матеріал знаходиться у доброму узгодженні зі схемою Майера. Це є безперечним досягненням моделі оболонок. Модель ядерних оболонок порівняно задовільно пояснює і деякі інші властивості ядер і ядерних явищ.

Лекція 35. ЯДЕРНІ РЕАКЦІЇ І ЇХ КЛАСИФІКАЦІЯ

§121. Типи ядерних реакцій.

§122. Символіка під час запису ядерних реакцій.

§123. Класифікація ядерних реакцій за енергією, за родом реагуючих ядер і частинок, за характером ядерних перетворень.

§124. Ефективний переріз σ ядерних реакцій. Функція

збудження ядер $\sigma(E)$.

[3. §3.1-§3.8; 5. §3.4-§3.8; 6. §6.1-§6.7. §7.1-§7.4; 9. §6.1]

§121. Типи ядерних реакцій

Ядерними реакціями називається перетворення атомних ядер, що відбувається в результаті їх взаємодії з елементарними частинками або одне з одним. Ядерні реакції виникають внаслідок бомбардування ядер деякої речовини потоком прискорених частинок: протонів, α -частинок, нейтронів тощо. В лабораторних умовах ядерні реакції у багатьох випадках здійснюють для з'ясування механізму взаємодії нуклонів один з одним і нуклонів з ядрами або для визначення тієї чи іншої квантової характеристики ядра.

Відомо багато різних типів реакцій. В залежності від частинок, що викликають реакції їх можна класифікувати на реакції під дією нейтронів, під дією заряджених частинок і під дією γ -квантів. Останні відбуваються під дією не ядерної, а електромагнітної взаємодії, але також відносяться до ядерних реакцій, так як взаємодія відбувається в області ядра і призводить до його перетворення.

З точки зору механізму взаємодії реакції поділяють на два класи: реакції, що йдуть через проміжну стадію утворення складового ядра і прямі взаємодії.

Розрізняють наступні записи типів ядерних реакцій:

$$\begin{aligned}A &\rightarrow B + b; \\A + a &\rightarrow C^* \rightarrow B + b; \\A + a &\rightarrow B + b_1 + b_2 + b_3 + \dots; \\A + a &\rightarrow B_1 + B_2 + b_1 + b_2 + \dots; \\A + a &\rightarrow B^* \rightarrow B + \gamma,\end{aligned}$$

де великими літерами позначено ядра атомів, малими літерами - елементарні частинки.

Під час вивчення ядерної реакції представляють інтерес ідентифікація каналів реакції, порівняльна ймовірність її протікання по різних каналам за різних значень енергій частинок, які вступають у взаємодію, енергія і кутовий розподіл частинок, що утворюються, а також їхній внутрішній стан (енергія збудження, спіні, парність, ізотопічний спіні тощо). Багато відомостей про ядерні реакції можна отримати в результаті застосування законів збереження, які накладають певні обмеження на характер протікання ядерних реакцій. Відомі наступні закони збереження: електричного заряду; числа нуклонів; енергії, імпульсу; моменту кількості руху; парності;

ізотопічного спіну.

§122. Символіка під час запису ядерних реакцій

В результаті інтенсивної взаємодії вихідного ядра A і частинки a , яка взаємодіє, утворюються нове ядро - ядро продукт B і деяка частинка b , що розлітаються в різних напрямках від місця зіткнення. В багатьох ядерних реакціях бере участь одна вихідна пара (ядро A і частинка a) і друга кінцева пара (ядро продукт B і частинка b). Ядерні реакції символічно записуються так:

$$A + a \rightarrow \begin{cases} A + a \text{ або } A(a, a)A \\ A^* + a \text{ або } A(a, a)A^* \\ B + b \text{ або } A(a, b)B \\ \dots \dots \dots \end{cases} \quad (122.1)$$

За великої енергії частинки a замість однієї частинки може народитися декілька частинок $b_1, b_2, \dots$. В загальному випадку зіткнення бомбардуючої частинки з ядром може призвести до різних результатів. Так, наприклад, можлива така взаємодія, за якої склад ядра-мішені і внутрішня енергія його не змінюються, в результаті зіткнення частинка й ядро розлітаються і підлягають закону пружного удару. Взаємодія такого виду носить назву *пружного розсіювання* і записується у вигляді:

$$A + a \rightarrow a + A \text{ або } A(a, a)A. \quad (122.2)$$

Можливі взаємодії, в результаті яких як і в першому випадку, залишається падаюча частинка і вихідне ядро мішені, але у цьому воно знаходиться в збудженому стані. Тоді сума кінетичних енергій після зіткнення менша, ніж до нього. Така взаємодія називається *непружним розсіюванням* і записується у вигляді:

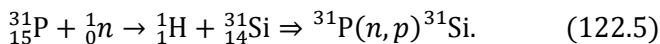
$$A + a \rightarrow A^* + a \text{ або } A(a, a)A^*. \quad (122.3)$$

Причому зірочка вказує на збуджений стан кінцевого ядра. Також можливі і такі взаємодії, за яких склад ядра-мішені змінюється, а відповідно, частинка, що вилітає із ядра відмінна від тієї, яка входила до нього. Цей випадок взаємодії може бути записаний у вигляді:

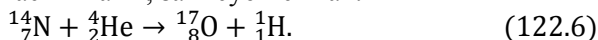
$$A + a \rightarrow B + b \text{ або } A(a, b)B. \quad (122.4)$$

Такі перетворення часто і називають *ядерними реакціями*. Ядра A , B і частинки a , b , що беруть участь в ядерній реакції, записуються відповідними символами, які вказують на масове число і порядковий номер елемента Z . Зробимо символічний запис ядерної реакції на прикладі взаємодії хімічного елемента фосфору ($^{31}_{15}\text{P}$) із нейтроном

(^1_0n) , отримаємо:



Наприклад, реакція, проведена в 1919 році Е. Резерфордом для обстрілу ядер азоту α -частинками, записується так:



В результаті реакції отрималось ядро ізоотопу кисню $^{17}_8\text{O}$ і протон $p \equiv ^1_1\text{H}$. Це була історично перша ядерна реакція, яка була проведена людиною.

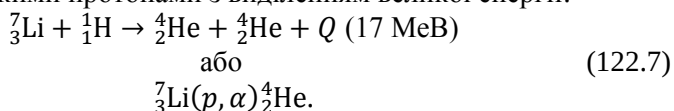
Наведемо, ще декілька прикладів реакцій, що мають історичне значення (табл. 12).

Таблиця 12

№ п/п	Тип реакції	Приклад	Примітка
1.	(α, n)	$^{27}_{13}\text{Al} + ^4_2\text{He} \rightarrow ^1_0n + ^{30}_{15}\text{P}$ або $^{27}\text{Al}(\alpha, n)^{30}\text{P}$	Реакція цього типу дозволила подружжю Жоліо-Кюрі відкрити природну радіоактивність.
2.	(α, n)	$^9_4\text{Be} + ^4_2\text{He} \rightarrow ^1_0n + ^{12}_6\text{C}$ або $^9\text{Be}(\alpha, n)^{12}\text{C}$	Під час проведення цієї реакції в 1932 році Чедвік відкрив нейтрон.
3.	(p, α)	$^7_3\text{Li} + ^1_1\text{H} \rightarrow 2^4_2\text{He}$ або $^7\text{Li}(p, \alpha)^4\text{He}$	Перша реакція, зумовлена за допомогою частинок, прискорених у прискорювачі (Конрофт і Уолтон, 1932 р.)
4.	(p, pn)	$^{63}_{29}\text{Cu} + ^1_1\text{H} \rightarrow ^1_0n + ^1_1\text{H} + ^{62}_{29}\text{Cu}$ або $^{63}\text{Cu}(p, pn)^{62}\text{Cu}$	Дослідження цих реакцій допомогло з'ясувати механізм протікання ядерних реакцій.
5.	$(p, 2n)$	$^{63}_{29}\text{Cu} + ^1_1\text{H} \rightarrow 2^1_0n + ^{62}_{30}\text{Zn}$ або $^{63}\text{Cu}(p, 2n)^{62}\text{Zn}$	Дослідження цієї реакції допомогло з'ясувати механізм протікання ядерних реакцій.
6.	(p, γ)	$^7_3\text{Li} + ^1_1\text{H} \rightarrow \gamma + ^8_4\text{Be}$ або $^7\text{Li}(p, \gamma)^8\text{Be}$	Реакція слугує джерелом жорстких гама-променів (17 MeB).
7.	(n, γ)	$^{238}_{92}\text{U} + ^1_0n \rightarrow \gamma + ^{239}_{92}\text{U}$ або	Перша із ядерних реакцій, в результаті якої отримано

		$^{238}\text{U}(n, \gamma)^{239}\text{U}$	трансурановий елемент.
8.	(d, p)	$^{26}_{12}\text{Mg} + ^2_1\text{H} \rightarrow ^1_1\text{H} + ^{27}_{12}\text{Mg}$ або $^{26}\text{Mg}(d, p)^{27}\text{Mg}$	Реакція вибуху, яку теоретично обґрунтував винахідник атомної бомби Опенгеймер.
9.	(γ, n)	$^2_1\text{H} + \gamma \rightarrow ^1_0n + ^1_1\text{H}$ або $^2\text{H}(\gamma, n)^1\text{H}$	Проста фотоядерна реакція, здійснена Чедвіком і Гольдгабером.

Реакція Конрофта і Уолтона (табл. 12) під час бомбардування ядер літію швидкими протонами з виділенням великої енергії:



Величина Q в реакції називається *енергією ядерної реакції* і чисельно дорівнює різниці енергії кінцевої і вихідної пар в реакції. Ядерні реакції, що протікають з виділенням енергії ($Q > 0$), називаються *екзотермічними*. Реакції, які можуть відбуватися тільки з поглинанням енергії ($Q < 0$), називаються *ендотермічними*. Ендотермічна ядерна реакція стає можливою лише за деякої мінімальної енергії $\mathcal{E}$ частинки, що налітає в L -системі і C -системі. Ця енергія і називається *пороговою енергією* даної ендотермічної реакції

$$\mathcal{E}_{\text{порог.}} = \mathcal{E}_0 = -\frac{M_A + M_a}{M_A} Q, \quad (122.8)$$

де M_A - маса нерухомого вихідного ядра A ; M_a - маса частинки a , що налітає.

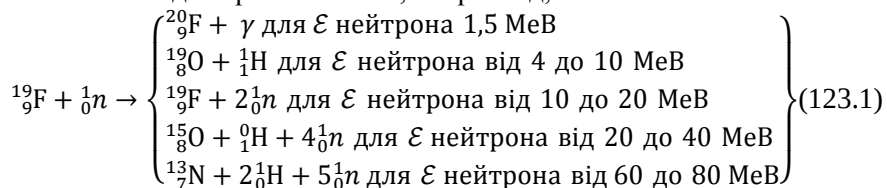
Наприклад, ендотермічна ядерна реакція відбудеться тільки у тому випадку, якщо енергія відносного руху частинок M_A і M_a буде менша теплового ефекту реакції Q .

§123. Класифікація ядерних реакцій за енергією, за родом реагуючих ядер і частинок, за характером ядерних перетворень

В наш час відомо біля 1500 різних ізотопів. Для кожного із цих ізотопів отримано декілька ядерних реакцій, в яких він може вступати або в результаті яких утворюється. Тому дуже важливим є питання про правильну класифікацію ядерних реакцій за тими або іншими ознаками.

Ядерні реакції класифікуються за: 1) енергією частинок, що викликають їх; 2) родом частинок, що беруть участь в них; 3) виглядом частинок, що беруть участь в них; 4) енергетичним (тепловим) ефектом; 5) характером ядерних перетворень, що відбуваються.

1. За значенням енергії розрізняють ядерні реакції для малих, середніх і високих енергій. Реакції для малих енергій, приблизно в декілька електрон-вольт, відбуваються в основному з участю нейтронів. Реакції за середніх енергій (до декількох мегаелектрон-вольт) викликаються нейтронами, а також зарядженими частинками і γ -фотонами. За високих енергій (сотні і тисячі мегаелектрон-вольт) реакції призводять до розкладання ядер на відповідні їм нуклони і до народження елементарних частинок. Один і той же вид частинок, що взаємодіють з однаковими ядрами, викликають різні перетворення в залежності від енергії частинки, наприклад,



2. За родом частинок, що беруть участь в ядерних реакціях розрізняють реакції під дією: а) нейтронів; б) фотонів; в) заряджених частинок (протонів, дейтронів, α -частинок і багатозарядних іонів).

Реакції, що відбуваються за участі заряджених частинок, потребують, щоб частинки мали достатньо велику енергію, яка необхідна для подолання сильного кулонівського поля ядра (потенціального бар'єру). Джерелами заряджених частинок є: природно-радіоактивні елементи, прискорювачі заряджених частинок, космічне проміння.

Ядерні реакції під дією тих або інших частинок в свою чергу поділяються на групи за виглядом частинок, що утворюються в ядерних реакціях. Наприклад, нейтронні ядерні реакції підрозділяються на $n\alpha$, np , nD , ny , тобто на реакції, що випромінюють α -частинки, протони, дейтрони, фотони.

3. За виглядом частинок, що беруть участь в ядерних реакціях атомних ядер розрізняють реакції на легких ядрах, для яких $A < 50$; реакції на середніх ядрах, для яких $50 < A < 100$, і реакції на важких ядрах з $A > 100$.

4. За енергетичним (тепловим) ефектом ядерні реакції

поділяються на екзотермічні і ендотермічні.

5. За характером ядерних перетворень реакції розрізняють: кулонівське збудження, радіаційне захоплення, реакції вибуху, поділу ядер, ядерний фотоефект тощо.

§124. Ефективний переріз σ ядерних реакцій. Функція збудження ядер $\sigma(E)$

У експериментальних дослідженнях ядерних реакцій предметом вивчення завжди є: а) тип реакції (тобто розпізнання продуктів реакції); б) визначення виходу або поперечного перерізу реакції; в) кутовий розподіл продуктів реакції; г) енергія і величина поляризації продуктів реакції. Останні величини вимірюються в залежності від енергії падаючої частинки.

Якщо одне досліджуване ядро знаходиться на шляху потоку бомбардуючих частинок, то ймовірність W ядерної реакції за одиницю часу пропорційна густині потоку Π :

$$W = \sigma \Pi. \quad (124.1)$$

Коефіцієнт пропорційності σ в цьому виразі має розмірність площі. Він є не що інше як ефективний переріз ядерної реакції. Якщо в бомбардуючій мішені знаходиться N ядер, то за одиницю часу в ній буде відбуватися:

$$n = N\sigma\Pi \quad (124.2)$$

ядерних перетворень.

Якщо під дією бомбардуючих частинок в даному діапазоні їх енергій відбуваються різні перетворення атомних ядер, то сумарна ймовірність будь-яких перетворень характеризується повним перерізом, який є сумою перерізів всіх можливих процесів.

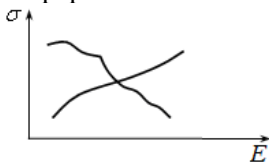


Рис. 127

Дуже істотною характеристикою ядерних реакцій є залежність їх перерізу від енергії падаючої частинки. На рисунку 127 на осі абсцис відкладається енергія E бомбардуючої частинки, а на осі ординат ефективний переріз σ ядерної реакції. Криві $\sigma(E)$ називаються *функціями збудження ядерної реакції*.

Функції збудження можуть бути різко відрізнятися як для реакцій, що зумовлені різними частинками, так і для реакцій, що викликані однаковими частинками. Зокрема, з'ясуємо вигляд функції збудження реакцій викликаних нейтронами. На рисунку 128 представлений приблизний хід функції збудження для трьох типів ядерних реакцій, що викликані нейтронами (n, γ) , (n, p) , $(n, 2n)$.

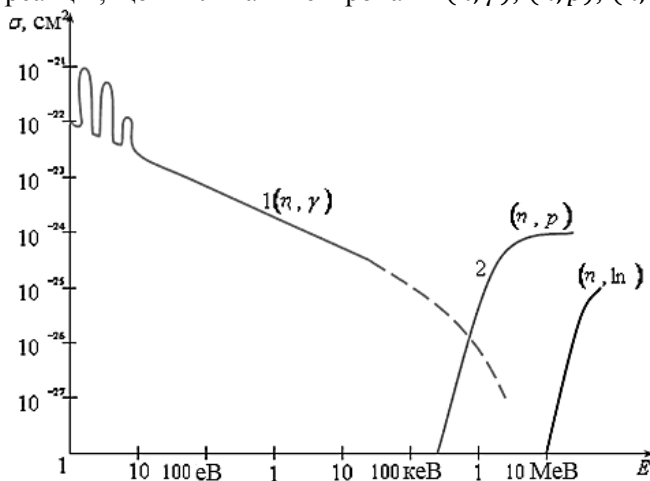


Рис. 128

З величиною перерізу пов'язана ще одна важлива характеристика - вихід ядерної реакції, тобто відношення числа ядерних перетворень, що відбулися до числа частинок, які впали на мішень. Очевидно, що ця величина пов'язана не тільки з природою й енергією падаючих частинок, але і з товщиною мішені, яку часто виражають не в одиницях довжини, а через число атомів, що припадає на 1 cm^2 мішені:

$$n = h\rho \frac{6,02 \cdot 10^{23}}{A}, \quad (124.3)$$

де h - товщина мішені (cm^{-2}); ρ - густина; A - масове число мішені.

Якщо на всі ядра мішені падає однаковий потік частинок з однаковою енергією, то вихід Y дорівнює:

$$Y = P\sigma n. \quad (124.4)$$

Однак в дійсності ця умова виконується лише для тонкої мішені, в якій падаючі частинки мало змінюють свою енергію. Тоді в товстій мішені ядерне перетворення може відбуватися за будь-якого значення енергії падаючої частинки. Отже, вихід ядерної реакції як

функція енергії, представляє собою грубу характеристику реакції (ефективний переріз усереднюється у широкому інтервалу енергії).

Лекція 36. ОСНОВНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ ЯДЕРНИХ РЕАКЦІЙ

§125. Характер протікання ядерної реакції за Бором. Компаунд-ядро (складне) і його характеристики.

§126. Гіпотеза Бора про незалежність розпаду компаунд-ядра від способу його одержання.

§127. Резонансні явища у ядерних перетвореннях. Ширина Γ енергетичного рівня і її зв'язок з дискретними ймовірностями розпаду збудженого ядра. Повна ширина енергії збудження та повна ймовірність розпаду ядра.

§128. Формула Брета-Вігнера для опису резонансних функцій збудження ядра.

§129. Шляхи вивільнення ядерної енергії для потреб народного господарства: а) ядерний синтез; б) реакції поділу важких ядер.

[5. §3.4, §5,1-§5.6; 6. §6.1-§6.7, §7.1-§7.5; 9. §6.2]

§125. Характер протікання ядерної реакції за Бором. Компаунд-ядро (складне) і його характеристики

Раніше ми розглядали моделі, що описували структуру ядра, розміщення його енергетичних рівнів, їх квантових характеристик тощо. Зараз варто зупинитися на моделях, які використовуються для якісного і кількісного опису взаємодії прискорених нуклонів та інших частинок з ядрами. Природно, що ці моделі повинні пояснювати вже перевірені експериментальні дані, як наприклад, наявність різних резонансів в перерізах ядерних реакцій, що переважають переріз захвату над перерізом розсіювання в резонансі, характер кутового розподілу продуктів, що вилітають тощо.

Пояснення великого класу ядерних реакцій стало можливим завдяки висунутому Н. Бором в 1936 році положенню про те, що вони протікають у два етапи. Опираючись на надзвичайно густу «упаковку» нуклонів у ядрі і малий радіус дії ядерних сил Бор зробив висновок, що нуклони, які утворюють ядро і падаючі на нього частинки, сильно взаємодіють один з одними. В силу цього для

досягнення поверхні ядра падаючий нуклон і ядро миттєво зливаються і утворюють проміжний стан - складне, або як часто називають, *компаунд-ядро* в збудженому стані:



Схематично цей процес зображений на рисунку 129, тобто картина утворення і розпаду складного ядра. Збуджене складне ядро енергетично не вигідна система, за таких умов воно розпадається шляхом випускання якої-небудь частинки або γ -кванту:

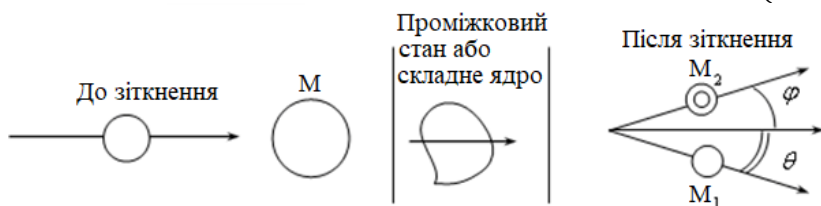


Рис. 129

За наявності цих двох стадій переріз $\sigma(a, b)$ ядерної реакції $A + a \rightarrow C^* \rightarrow B + b$ можна подати як вираз ймовірності поглинання частинок a ядром A на ймовірність такого його розпаду, який веде до утворення продуктів b і B :

$$\sigma(a, b) = \sigma_a W_b, \quad (125.3)$$

де σ_a - є по суті переріз утворення проміжного ядра; W_b - частина його розпадів, що веде до випромінювання частинок b .

Час життя складного ядра або ймовірність його розпаду як ми бачили можна оцінити, знаючи ширину рівня збудження ядра

$$\Gamma = \frac{h}{\tau}.$$

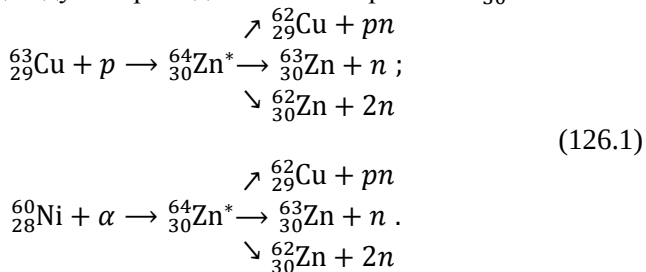
Значення широт, отриманих із дослідів, показали, що складне ядро - надзвичайно живуча система ($10^{-14} - 10^{-16}$ с) порівняно з характерним ядерним часом взаємодії (10^{-23} с). Звідси слідує, що якщо б ядерні реакції відбувались за простого пронизання ядра налітаючої частинки, то час їх здійснення був би на 5-7 порядків меншим.

§126. Гіпотеза Бора про незалежність розпаду компаунд-ядра від способу його одержання

Оскільки довгий час не є неочікуваний з точки зору Бора, то

падаючий нуклон або частинка, попавши в ядро за наявності сильної взаємодії швидко перерозподіляють свою енергію серед усіх нуклонів ядра, завдяки багатократним зіткненням, у цьому навіть за енергій падаючих нуклонів порядку 30 MeV і масових чисел $A = 50$ жодна частинка не може покинути ядро. Це пояснюється тим, що така частинка має додаткову енергію, дуже малу (0,6 MeV), у порівнянні з енергією зв'язку нуклона в ядрі (7 – 8 MeV). Концентрація енергії збудження складного ядра на одній частинці малоімовірна, що і призводить до довгого перебування проміжного ядра в збудженому стані. Ця обставина накладає відбиток на продукти реакції, так як природно припускати, що за такий великий час в складному ядрі встановилася повна статистична рівновага і ядро ніби «забуло», яким способом було одержано. На цій основі Бор ввів гіпотезу про незалежність розпаду складного ядра від способу його утворення, яка виявилася надзвичайно плідотною у поясненні багатьох експериментальних результатів за малих енергій.

Гіпотезу Бора підтверджують результати досліджень шести ядерних реакцій, що йдуть через один і той же проміжок ${}^{64}_{30}\text{Zn}$



У здійсненні цих реакцій енергії протонів, що бомбардують ядро і α -частинок брались такими, що енергія збудженого складного ядра ${}^{64}\text{Zn}^*$ виявлялася у всіх випадках однаковою.

§127. Резонансні явища у ядерних перетвореннях. Ширина Γ енергетичного рівня і зв'язок її з дискретними ймовірностями розпаду збудженого ядра. Повна ширина енергії збудження та повна ймовірність розпаду ядра

Якщо згідно викладених вище представлень $\sigma(a, b) = \sigma_a W_b$, то для реакцій, що визначаються бомбардуванням одних і тих же частинок, отримаємо:

$$\frac{\sigma(a_1, b_1)}{\sigma(a_1, b_2)} = \frac{\sigma a_1 W b_1}{\sigma a_1 W b_2} = \frac{W b_1}{W b_2}. \quad (127.1)$$

Для реакцій, що відбуваються під дією частинок a_1 , але таких, що ведуть до утворення тих же продуктів b_1 і b_2 , аналогічно запишемо:

$$\frac{\sigma(a_2, b_1)}{\sigma(a_2, b_2)} = \frac{\sigma a_2 W b_1}{\sigma a_2 W b_2} = \frac{W b_1}{W b_2}. \quad (127.2)$$

Згідно міркувань Бора, ймовірність розпаду W_b не залежить від способу, яким утворилось складне ядро, а лише від його енергії збудження. В нашому випадку енергії α -частинок і протонів такі, що складне ядро отримується для p і α -реакцій в станах з однаковим збудженням, у цьому випадку праві частини виразів рівні, відповідно, рівними повинні бути і відношення перерізів:

$$\frac{\sigma(a_1, b_1)}{\sigma(a_1, b_2)} = \frac{\sigma(a_2, b_1)}{\sigma(a_2, b_2)}. \quad (127.3)$$

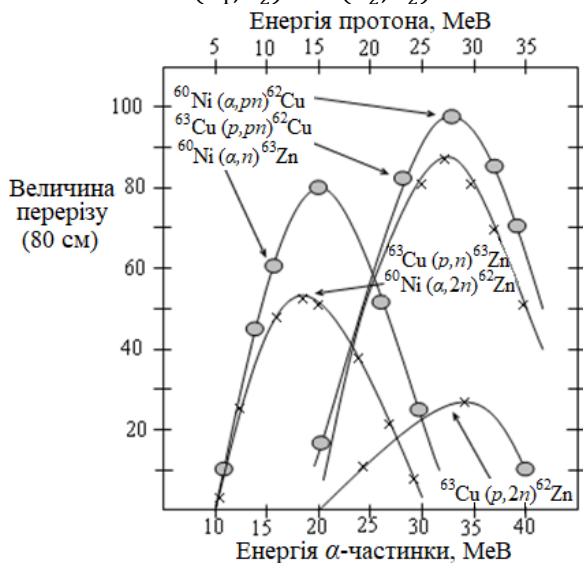


Рис. 130

На рисунку 130 показані експериментальні дані в межах точності дослідів, що підтверджують вказані відношення, тобто в цих конкретних реакціях ймовірність розпаду складного ядра дійсно не залежить від способу його утворення. Показано переріз ядерних реакцій, що викликані протонами і α -частинками, які протікають

через стадію одного і того ж складного ядра - $^{64}\text{Zn}^*$. Однак у цьому випадку виявилось, що переріз реакцій $(\alpha, 2n)$ і $(p, 2n)$ набагато менший (α, pn) і (p, pn) , хоча здавалось, що вихід протонів повинен бути меншим через вплив кулонівського бар'єру. На викладі цього факту ми зупинимось нижче.

§128. Формула Брета-Вігнера для опису резонансних функцій збудження ядра

Раніше ми наводили один із типових прикладів залежності перерізу реакцій від енергії падаючих частинок (рис. 128, крива n, γ). Із рисунка видно різке збільшення перерізу за деяких значень енергії налітаючих частинок. Схематично ця залежність відтворена на рисунку 131.

Особливо, чітко це показано на рисунку 132, тобто залежність виходу γ -проміння з енергією 3,9 МеВ, що виникають у реакції $^{10}\text{B}(\alpha, p)^{13}\text{C}^*$ від енергії α -частинок. Бор передбачив, що збільшення перерізу пов'язане з резонансним захватом падаючої частинки, коли її енергія дорівнює одному із енергетичних рівнів складного (проміжного) ядра. Через деякий проміжок часу це було доведено в теоретичних працях Брейта і Вігнера.



Рис. 131

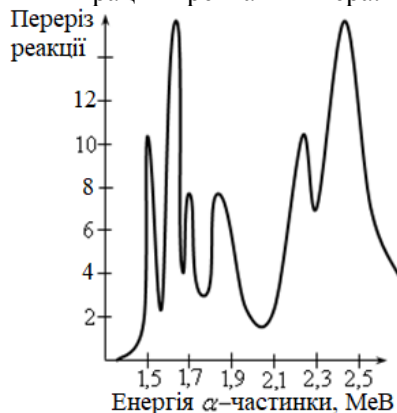


Рис. 132

Багаточисленні експериментальні дослідження показали, що в ядерних реакціях резонансні явища добре описуються формулою Брейта-Вігнера, згідно якої переріз реакції по каналу b у вхідному каналі a дорівнює:

$$\sigma(a, b) = \left[\pi \lambda^2 g \frac{\Gamma_a \Gamma_s}{(E - E_s) + \frac{1}{4} \Gamma_s^2} \right] \left[\frac{\Gamma_b}{\Gamma_s} \right] \quad (128.1)$$

де E_s - енергія резонансного рівня; $\Gamma_s = \sum_a \Gamma_a$ - повна ширина резонансного рівняння; Γ_b - парціальна ширина резонансного рівняння, що відповідає розпаду складного ядра по каналу b , тобто з випромінюванням α -частинки; g - множник, що залежить від спіну падаючої частинки і повного спіну в системі.

Як видно із виразу (128.1), переріз складається із двох множників. Перший із них можна інтегрувати як переріз утворення складного ядра по каналу a , а другий - як відносну ймовірність розпаду по каналу b . Добре співпадання експериментальних результатів з формулою (128.1) є першим доказом проміжного ядра. Але ця картина спостерігається до тих пір, поки енергія падаючої частинки така, що попадає в область окремих ізольованих рівнів складного ядра. За великих енергій збудження застосовується інший метод опису ядерних реакцій.

§129. Шляхи вивільнення ядерної енергії для потреб народного господарства: а) ядерний синтез; б) реакції поділу важких ядер

Розглянемо шляхи вивільнення ядерної енергії. Ядерна енергія в загальному займає важливе місце в енергетичному балансі людства.

В зв'язку з ростом механізації виробництва, з розширенням всіх видів зв'язку і транспорту росте також із року в рік й потреба в енергії. А також росте чисельність населення земної кулі і з цим ще більше ростуть енергетичні потреби людства.

Людство завжди вело боротьбу за збільшення енергетичних ресурсів. У даному випадку наука шукає вихід із утвореного глухого кута – відкриття нових джерел енергії.

Таким новим джерелом енергії для людства може бути енергія атомного ядра. В надрах атомного ядра закриті колосальні запаси енергії. Цю енергію людство може використати для своїх цілей.

В наш час відомі два способи (шляхи) вивільнення ядерної

енергії.

Перший шлях - вивільнення внутрішньоядерної енергії в процесі ланцюгової реакції ділення ядер урану, плутонію, тору. З цією цілю створюються ядерні реактори, в яких протікає керований процес ділення важких атомних ядер. Енергія, що виділяється у цьому випадку називається *ядерною енергією ділення* або *атомною енергією*.

Другий шлях - вивільнення ядерної енергії під час злиття (синтезу) легких атомних ядер в більш важкі. Наприклад, за високих температур (10-20 млн. град.) атомні ядра водню (дейтерій (D^2), тритій (T^3)) зливаються в ядро гелію, у цьому випадку виділяється велика кількість енергії. Це впливає із залежності питомої енергії зв'язку f ($f = \frac{W_{зв}}{A}$) від масового числа A (рис. 133). Для гелію питома енергія зв'язку більша ніж водню (дейтерію, тритію). Це означає, що існування атомів гелію енергетично більш вигідне, ніж атомів дейтерію і тритію окремо.

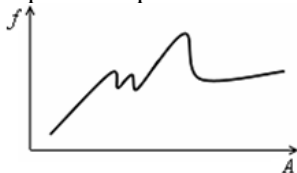


Рис. 133

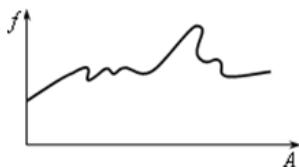


Рис. 134

Реакції злиття легких ядер, що протікають за високих температур, отримали назву *термоядерних реакцій*. Термоядерні реакції, «запалені рукою людини» на Землі, дали про себе знати вибухом водневої бомби.

Щоб забезпечити легкі ядра, треба подолати їх кулонівське відштовхування. Сила відштовхування двох зарядів визначається за формулою:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{\text{я}}^2},$$

де $r_{\text{я}}$ - радіус дії ядерних сил ($r_{\text{я}} \sim 2 \cdot 10^{-15}$ м).

Енергія взаємодії

$$W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{\text{я}}}.$$

Навіть для $Z_1 = Z_2 = 1$ ця енергія $\Delta W \approx 0,7$ МеВ. На кожне ядро, що відштовхується, припадає енергія 0,35 МеВ. Середній

енергії теплового руху відповідає температура $2,6 \cdot 10^9$ К. Але частина ядер має енергію значно більшу від середньої енергії теплового руху. Тому деякі термоядерні реакції відбуваються за температур $\sim 10^9$ К.

Лекція 37. РЕАКЦІЇ ПОДІЛУ ВАЖКИХ ЯДЕР. ЯДЕРНИЙ РЕАКТОР

§130. Стійкість масивних ядер. Умова стійкості ядра. Порогова енергія поділу - енергія активації ядра.

§131. Збудження масивних ядер нейтронами і умова їх поділу. Можливість викликання реакції поділу нейтронами в ядерних ізотопах.

§132. Оцінка вивільнення енергії під час ділення ядра ${}^{235}_{92}\text{U}$.

§133. Пояснення високої β -активності новостворених ядер-продуктів поділу ядра урану ${}^{235}_{92}\text{U}$.

§134. Ланцюгова реакція в ядерних реакторах. Коефіцієнт розмноження нейтронів у ядерному реакторі. Реактори на швидких нейтронах (брідер).

[3. §3.1-§3.8; 5. §3.5-§3.8, §5.1-§5.6; 6. §8.1-§8.4; 9. §6.3]

§130. Стійкість масивних ядер. Умова стійкості ядра. Порогова енергія поділу - енергія активації ядра

З'ясуємо умову нестійкості атомних ядер відносно ділення. Припустимо, що ядро ділиться на дві частини з масовими числами kA і $(1-k)A$ і масами $M_1 \equiv M(kA, kZ)$ і $M_2 \equiv M[(1-k)A, (1-k)Z]$. Оскільки нуклони в ядрі розміщені рівномірно, то можна вважати, що і заряд ядра між осколками розподіляється також як і масове число, тобто і заряди осколків утворюють kZ і $(1-k)Z$.

Як відомо, якщо маса ядра M , яке ділиться більша суми мас M_1 і M_2 , осколків і кінетичної енергії осколків $\mathcal{E}_0^k$, вираженої в масових одиницях

$$\Delta M = M - (M_1 + M_2 + \mathcal{E}_0^k) \geq 0, \quad (130.1)$$

то ядро нестійке відносно ділення на дві частини.

Енергія $\mathcal{E}_0^k$ є мінімальною кінетичною енергією осколків, якої вони обов'язково набудуть під дією кулонівських сил. Якщо ж в момент ділення утворені осколки вже мають деяку кінетичну енергію

ε_1^k , то їх кінетична енергія, після того як осколки розійдуться на більшу відстань, буде:

$$\varepsilon^k = \varepsilon_1^k + \varepsilon_0^k. \quad (130.2)$$

Обчислимо величину ε_0^k , приймаючи для простоти, що вихідне сферичне ядро розділилось на два також сферичних ядра, які дотикаються відповідного об'єму (рис. 135).

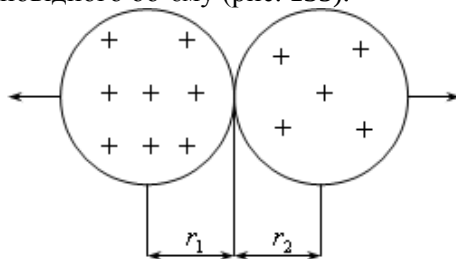


Рис. 135

Підрахуємо величину енергію осколків

$$\varepsilon_0^k = 6070 \cdot 10^9 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon(r_1 + r_2)} \text{ у а. о. м.}, \quad (130.3)$$

де $Z_1 e = kZe$ і $Z_2 e = (1 - k)Ze$ - заряди осколків; r_1, r_2 - їх радіуси.

Так як густина ядерної речовини осколків така ж як і густина в вихідному ядрі, то маємо:

$$\left. \begin{aligned} r_1 &= r_0 k^{1/3} A^{1/3}; \\ r_2 &= r_0 (1 - k^{1/3}) A^{1/3}. \end{aligned} \right\} \quad (130.4)$$

Співвідношення (130.3) з врахуванням цього переписеться:

$$\varepsilon_0^k = 1,045 \cdot 10^{-3} \frac{k(1 - k)}{k^{1/3} + (1 - k)^{1/3}} \frac{Z^2}{A^{1/3}}. \quad (130.5)$$

Відомо, що маса ядра (нехтуючи членом і враховуючи підвищену стійкість парно-парних ядер) може бути записана:

$$\begin{aligned} M(A, Z) &= 0,99360A - 0,00084Z + 0,01399A^{2/3} + \\ &+ 0,02742 \frac{(A - 2Z)^2}{A} + 0,000627 \frac{Z^2}{A^{1/3}}, \end{aligned} \quad (130.6)$$

де знак мінус береться для парного Z , а знак плюс - для непарного.

Використовуючи співвідношення (130.6) і формулу (130.5), знайдемо вираз для ΔM :

$$\Delta M = M(A, Z) - \{M_1(kA, kZ) + M_2[(1 - k)A(1 - k)Z] + \varepsilon_0^k\} =$$

$$= 0,01399A^{\frac{2}{3}}\left\{1 - k^{\frac{2}{3}} - (1 - k)^{\frac{2}{3}}\right\} + 6,27 \cdot 10^{-4} \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} \times \\ \times \left\{1 - k^{\frac{5}{3}} - (1 - k)^{\frac{5}{3}}\right\} - 1,045 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{4}} k^{\frac{1}{3}} + (1 - k)^{\frac{1}{3}}} \geq 0.$$

Звідси отримаємо:

$$\frac{Z^2}{A} \geq 22,31 \frac{\left(1 - k^{\frac{2}{3}}\right) + k^{\frac{2}{3}} - 1}{1 - k^{\frac{5}{3}} - (1 - k)^{\frac{5}{3}} - 1,666 \frac{k(1 - k)}{k^{\frac{1}{3}} + (1 - k)^{\frac{1}{3}}}}. \quad (130.7)$$

У випадку симетричного ділення $k = \frac{1}{2}$ і множник у правій частині (130.7) має вигляд дробу і набуває значення, що дорівнює 2,4, а величина $\frac{Z^2}{A}$ - значення 53,5. Ми отримаємо дещо завищену величину для дробового множника і для $\frac{Z^2}{A}$. Це відбулося за прийнятого нами спрощеного уявлення про те, що ділення ядра відбувається тоді, коли воно приймає форму вказану на рисунку 133. В дійсності, напевно, ядро розділиться вже за найменшого його відхилення від сферичної форми. Більш точний розрахунок дає значення для дробового множника в нерівності (130.7), що рівний 2. Таким чином, граничне значення $\frac{Z^2}{A}$, для якого ділення ядра стає можливим, дорівнює:

$$\left(\frac{Z^2}{A}\right)_{\text{гран}} = 45. \quad (130.8)$$

Всяке атомне ядро для якого

$$\left(\frac{Z^2}{A}\right) > \left(\frac{Z^2}{A}\right)_{\text{гран}} = 45 \quad (130.9)$$

не може бути стійким і воно буде розпадатись шляхом ділення за проміжок часу $\sim 10^{-21}$ с, характерний для ядерних реакцій, тобто практично миттєво. Такі ядра нестійкі і в природі не можуть зустрічатись. Ядра, для яких $\frac{Z^2}{A} < 45$, ведуть себе як квазістійкі системи. Умова стійкості ядра $\frac{Z^2}{A} > 45$.

Для визначення Z , якому відповідає $\frac{Z^2}{A} = 45$, побудуємо графік

залежності $\frac{Z^2}{A}$ від Z (рис. 136).

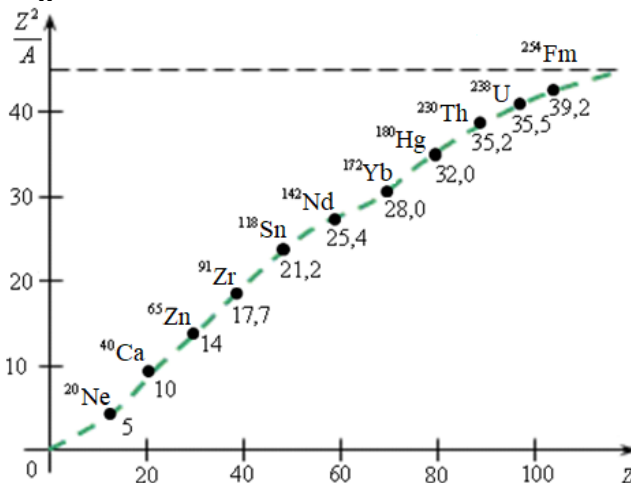


Рис. 136

Розглянемо цей графік залежності $\frac{Z^2}{A}$ від Z . Якщо його екстраполіювати, то отримаємо, що значенню $\frac{Z^2}{A} = 45$ відповідає $Z \approx 118 - 120$. Це значення, мабуть і визначає границю періодичної системи Д.І. Менделєєва.

§131. Збудження масивних ядер нейтронами і умова їх поділу. Можливість викликання реакції поділу нейтронами в ядерних ізотопах

В проведеному обчисленні з усіх взаємодій осколків ядра, що виникають у процесі ділення, ми врахували тільки кулонівське відштовхування. Однак у дійсності може бути те, що в процесі ділення ядро повинно пройти через проміжні стани, яким відповідає енергія, що перевищує енергію ядра, яке ділиться, інакше кажучи може бути, що початкова стадія ділення потребує затрати енергії на деформацію ядра-краплі. Енергія деформації ядра-краплі і поріг ділення відтворено на рисунку 137.

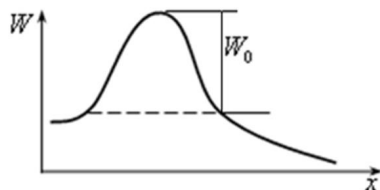


Рис. 137

Порогова енергія поділу це *енергія активації ядра*.

На рисунку 138 на осі абсцис відкладається параметр α , що характеризує деформацію ядра-краплі від початку процесу ділення, а після ділення - відстань між осколками; на осі ординат відкладається енергія ядра.

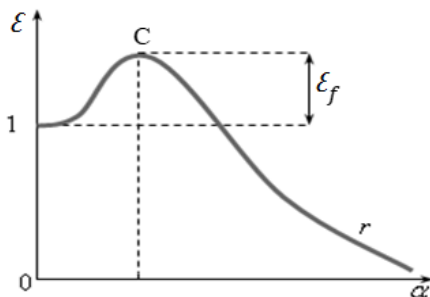


Рис. 138

Для того щоб ядро, що знаходилося спочатку в стійкому стані 1, підлягало поділу на дві частини і перейшло в стан 2, необхідно підвести енергію ϵ_f , яка називається *порогом ділення* або *енергією активації*.

Якщо енергія збудження ядра стане меншою енергії активації ϵ_f , то деформація збудженого ядра не дійде до «перевалу» (до точки С) і ядро не зазнає ділення, а випромінивши γ -фотон, повернеться в основний стан. Існування енергії активації ϵ_f під час ділення зумовлене наявністю потенціального бар'єру в просторі параметру α . Подолати цей бар'єр як необхідну умову ділення можна двома шляхами:

а) за рахунок привнесення енергії із зовні (ядро захоплює нейтрон або протон, α -частинку або γ -фотон), якщо ця енергія перевищує ϵ_f ;

б) за рахунок «тунельного» проходження осколка через бар'єр, подібно проникненню α -частинки через потенціальний бар'єр ядра, якщо ймовірність цього проходження не надто мала.

Перша може бути в результаті ядерної реакції, наприклад, під час захоплення ядром нейтрона, протона або γ -фотона.

Друга можливість - подання бар'єру шляхом «тунельного ефекту» - здійснюється лише у важких ядрах, що стоять у кінці періодичної системи і то з малою ймовірністю.

Розглянемо питання вимушеного ділення ядер під дією

нейтронів, використовуючи основні положення теорії ділення. Нехай ядро з масовим числом A і зарядом Z , захопило тепловий нейтрон. Ядро, що утворюється з тим же зарядом Z і масовим числом $A + 1$ (табл. 13). Це ядро перебуває в збудженому стані з енергією збудження, що дорівнює енергії зв'язку захопленого нейтрона ($7,5 \div 5,8$ MeV). Збуджене ядро приходить в коливання, то витягуючись то стискаючись, буде зазнавати деформації.

Таблиця 13

Вихідне ядро	Ядро, що утворилося під час поглинання, ${}^1_0n$	$\frac{Z^2}{A}$ для утвореного ядра	Енергія збудження ядра, що поглинув ${}^1_0n$, MeV	Енергія активації $\mathcal{E}_f$, MeV	Енергія нейтронів, що викликають ділення, MeV
${}^{112-124}_{50}\text{Sn}$	${}^{113-125}_{50}\text{Sn}$	22,12-20,0	6,5-8	40-50	швидкі, 34-42
${}^{196-204}_{80}\text{Hg}$	${}^{197-205}_{80}\text{Hg}$	32,5-31,2	6,6-8	11-15	швидкі, 5-7
${}^{226}_{88}\text{Ra}$	${}^{227}_{88}\text{Ra}$	34,11	6,5	7,6	швидкі
${}^{232}_{90}\text{Th}$	${}^{233}_{90}\text{Th}$	34,76	5,3	6,6	швидкі, 1,3
${}^{231}_{91}\text{Pa}$	${}^{232}_{91}\text{Pa}$	35,68	6,1	6,3	швидкі
${}^{233}_{92}\text{U}$	${}^{234}_{92}\text{U}$	36,32	5,9	5,5	теплові
${}^{234}_{92}\text{U}$	${}^{235}_{92}\text{U}$	36,01	5,8	6,2	швидкі, 0,4
${}^{235}_{92}\text{U}$	${}^{236}_{92}\text{U}$	35,90	6,8	6,6	теплові
${}^{238}_{92}\text{U}$	${}^{239}_{92}\text{U}$	35,46	5,7	7,1	швидкі, 1,4
${}^{239}_{94}\text{Pu}$	${}^{240}_{94}\text{Pu}$	36,81	6,9	5,1	теплові

Якщо енергія збудження перевищує енергію активації $\mathcal{E}_f$, то деформація складового ядра досягає критичної величини, на ядрі утворюється «перетяжка» і ядро зазнає ділення.

Якщо енергія збудження, привнесена в ядро під час захоплення теплового нейтрона, буде менша $\mathcal{E}_f$, то деформації, що виникають не досягнуть критичного значення і ядро не зазнає ділення під дією теплового нейтрона. Відповідно, ділення може бути викликано лише нейтронами, кінетична енергія яких не менша різниці енергії активації $\mathcal{E}_f$ і енергії зв'язку нейтрона. Ці прості уявлення дозволяють зрозуміти, чому одні ядра - ${}^{235}\text{U}$, ${}^{233}\text{U}$, ${}^{239}\text{Pu}$ - діляться

під дією теплових нейтронів, а інші ^{238}U , ^{234}U , ^{232}Th діляться лише під дією швидких нейтронів. У четвертому і п'ятому стовпці таблиці 13 наводяться значення енергії збудження і активації для деяких ядер.

Різниця в енергіях зв'язку нейтронів в ядрах ^{236}U і ^{239}U зумовлена залежністю величини енергії зв'язку нуклона від парності N або Z .

Під час утворення ядра ^{236}U (із ^{235}U) захоплений нейтрон є парним і його енергія зв'язку складає 6,8 МеВ. Енергія зв'язку нейтрона, що приєднується під час утворення ядра ^{239}U (із ^{238}U), як непарного нейтрона, складає лише 5,7 МеВ. Ця умова і відображає *правило Бора-Уйлера*, яке стверджує, що реакція ділення ядер (n, f) в ізотопів з непарним числом нейтронів - ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu відбувається на теплових нейтронах, а в той час як в ізотопів з парним числом нейтронів - ^{232}Th , ^{238}U , ^{240}Pu - ділення ядер викликається тільки швидкими нейтронами.

Енергія активації $\mathcal{E}_f$ для процесу ділення може бути представлена у вигляді добутку поверхневої енергії $\mathcal{E}_\sigma$ на деяку безрозмірну функцію $f(x)$:

$$\mathcal{E}_f = 4\pi\sigma R^2 f(x), \quad (131.1)$$

$$\text{де } f(x) = \frac{\frac{Z^2}{A}}{\left(\frac{Z^2}{A}\right)_{\text{порог}}}.$$

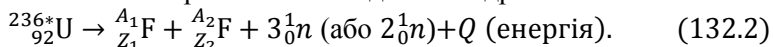
Таким чином, важкі ядра знаходяться в метастабільному стані і представляють «горючий матеріал» для реакції ділення ядер, а легкі ядра - «горючий матеріал» для реакції злиття (синтезу) ядер. Ядра із середнім значенням атомного номера (і масового числа) є більш стійкими відносно ділення і злиття.

§132. Оцінка вивільнення енергії під час ділення ядра $^{235}_{92}\text{U}$

Реакції ділення ядер під дією нейтронів (протонів, α -частинок) протікають у два етапи. Під час протікання цих реакцій виділяється велика енергія (~200 МеВ). Перший етап реакції (n, f) полягає в захопленні нейтрона і утворенні складного ядра з масовим числом $A + 1$. Наприклад,

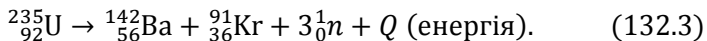


Складне ядро перебуває в збудженому стані. Воно може випромінювати γ -фотон і не зазнавати поділу. В багатьох випадках (84%) поглинання нейтрона викликає ділення ядра за схемою:

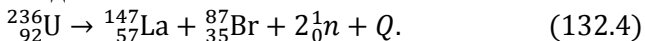


В цьому полягає другий етап реакції (n, f).

Ядра (продукти ділення) ${}^{A_1}_{Z_1}\text{F}, {}^{A_2}_{Z_2}\text{F}$ в рівнянні реакції (132.2) можуть бути дуже різними. Найбільш типовими прикладами реакції ділення є:



Можливе також ділення:



Продукти ділення дуже різноманітні, і, за даними, що існують, їх нараховується більше двохсот видів. Розподіл уламків ділення за масами зображений на рисунку 139. Як бачимо з рисунку 139, що розподіл уламків за масою зображується кривою з двома максимумами. Найбільш ймовірні значення мас уламків припадає на 95 і 139. Ділення на уламки рівної маси менш ймовірно та відбувається рідко.

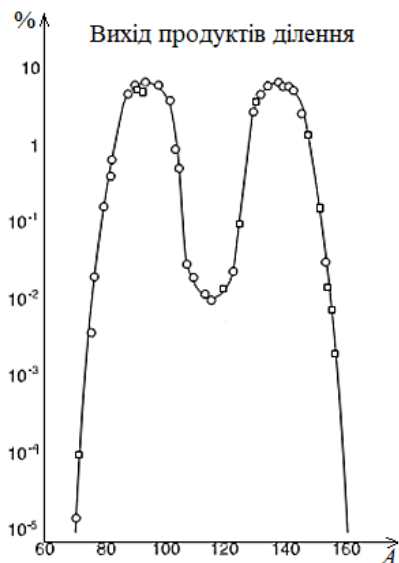


Рис. 139

Уламки ділення ядра мають велику кінетичну енергію. Енергія,

ядра урану ^{235}U , що вивільняється в одному акті ділення розподіляється приблизно так як наведено у таблиці 14.

Таблиця 14

Кінетична енергія уламків ділення	~165 MeV
Енергія швидких нейтронів	~4,9 MeV
Енергія миттєвих γ -квантів	~7,8 MeV
Енергія β -частинок, що виділяються під час розпаду продуктів ділення	~9 MeV
Енергія γ -квантів, що виділяються під час розпаду продуктів ділення	~7,2 MeV
Всього	194 MeV

Мабуть, біля 11 MeV складає енергія нейтрино, що утворюються під час β -розпаду. Вона практично не використовується. Однак все ж необхідно мати на увазі, що вся ця енергія (194+11) MeV, виділяється під час ділення, складає 0,1% всієї енергії (MeV), що відповідає масі ядра урану.

В момент ділення одного ядра випромінюється декілька нейтронів, які називаються *миттєвими* або *вторинними нейтронами*. Приведемо число ν вторинних нейтронів для ділення ядер ^{233}U , ^{235}U , ^{239}U тепловими нейтронами (табл. 15).

Таблиця 15

Ядро	^{233}U	^{235}U	^{239}U
ν	2,6	2,5	3,0

Під час ділення ядер ^{238}U під дією швидких нейтронів число ν близько до 2-2,5. На відміну від вторинних нейтронів, утворюються ще запізнюючі нейтрони, які звільняються через деякий час після ділення. Загальне число нейтронів, що запізняються не дуже велике, воно складає приблизно 75% від числа вторинних нейтронів.

§133. Пояснення високої β -активності новостворених ядер-продуктів поділу ядра урану $^{235}_{92}\text{U}$

Причина появи запізняючих нейтронів полягає в тому, що уламки, які виникають під час ділення, радіоактивні, і в результаті перетворень утворюються такі ядра, в яких є надлишок енергії, достатньої для «випаровування» нейтронів. Радіоактивність уламків, які виникають зумовлена тим, що вони мають великий надлишок

нейтронів над протонами у порівнянні з ядрами стійкого ізотопу. Такі ядра-уламки шляхом β^- -перетворень зменшує надлишок нейтронів, перетворюючись у стабільні ядра. Виходить цілий радіоактивний ряд у вигляді ланцюжка із 4-6 ланок.

Відкриття поділу ядер урану і ядер інших важких елементів дало можливість практичного здійснення ланцюгової ядерної реакції. Вдалося використати дві властивості ділення ядер.

1. Під час ділення ядер вивільняється велика енергія біля 200 МеВ на кожне розділене ядро.

2. Ділення ядер супроводжується вильотом вторинних нейтронів. Число вторинних нейтронів, що утворилися під час ділення одного ядра, більше одиниці (2,5-3). Ці вторинні нейтрони вдається використовувати для ділення наступних ядер. В результаті цього поділу з'являються знову нейтрони в більшій кількості, які можуть викликати нові акти поділу.

Ядерна реакція ділення важких ядер нейтронами, в результаті якої число нейтронів зростає і за таких умов може виникнути самопідтримуючий процес ділення, що називається *ланцюговою ядерною реакцією*. Як і будь-які розгалужені ланцюгові реакції, ланцюгові ядерні реакції є екзотермічними, тобто супроводяться виділенням великої енергії. Наприклад, енергія, що вивільняється під час ділення всіх ядер, що знаходяться в 1 кг ($2,55 \cdot 10^{24}$ ядер) урану-235, складає:

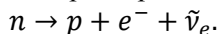
$$E = 2 \cdot 10^2 \cdot 2,55 \cdot 10^{24} \text{ МеВ} = 1,91 \cdot 10^{10} \text{ ккал} \approx 2 \cdot 10^{10} \text{ ккал}.$$
Це еквівалентно тій енергії, яка отримується від згорання, приблизно 1800 т бензину або 2500 т кам'яного вугілля.

Велике значення енергії, що вивільняється зумовлює практичне використання ланцюгового процесу поділу атомних ядер для мирних і військових цілей.

Під час бомбардування частинками високих енергій ядер ізоотопів з кінця періодичної таблиці елементів вдалося створити штучні ядра, які стали родоначальниками недовговічних радіоактивних сімей.

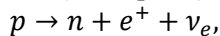
Штучні радіоактивні ізоотопи здебільшого β -активні, причому β^- -активність чи β^+ -активність радіоактивного ізоотопу можна встановити за допомогою діаграми залежності кількості нейтронів від кількості протонів у ядрі $N(Z)$ для стабільних і радіоактивних ядер (рис. 140). На діаграмі стабільні атомні ядра знаходяться в порівняно вузькій зоні, яка обмежена кривими 1 і 2. Ізоотопи, для яких

відношення $\frac{N}{Z} > \frac{N_{\text{ст}}}{Z_{\text{ст}}}$ перевищує значення, що відповідають кривій 1, належать до області протонodefіцитних ядер (область I). Радіоактивний розпад таких ядер має проходити так, щоб величина $\frac{N}{Z}$ зменшувалась, тобто зменшувалась в ядрі кількість нейтронів N . Тоді в ядрі відбуваються перетворення

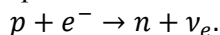


Отже, протонodefіцитні ядра у радіоактивному розпаді випромінюють β^- -частинки (електрони).

Навпаки ядра, що лежать нижче кривої 2, належать до області II нейтронodefіцитних ядер. В області II $\frac{N}{Z} < \frac{N_{\text{ст}}}{Z_{\text{ст}}}$ і радіоактивний розпад ядер відбувається так, щоб збільшувалась кількість нейтронів у ядрі. Це відбувається внаслідок зменшення кількості протонів або випромінювання β^+ -частинки (позитрони)



або захоплення електрона протоном



Штучні радіоактивні ядра утворюються також у процесі поділу важких ядер. Так, під час поділу $^{235}_{92}\text{U}$ утворюються два нових ядра, які належать до протонodefіцитних. Тому майже всі такі ядра випромінюють β^- -частинки.

Також встановлено, що самими ефективними нейтронами для ділення ядер ^{235}U є теплові нейтрони. Відповідно, вторинні нейтрони, що виникають під час ділення ядер ^{235}U та мають високі енергії (для деяких $\mathcal{E}_k \sim 1 \text{ MeV}$), з точки зору розвитку ланцюгової реакції доцільно сповільнити до теплових енергій ($\sim 0,025 \text{ eV}$), оскільки за таких умов зростає ефективний переріз ділення σ_f ядер ^{235}U .

Відомо, ефективний переріз поділу σ_f ядер ^{235}U тепловими нейтронами (з кінетичною енергією $\mathcal{E}_k \sim 0,025 \text{ eV}$) складає ~ 500 барн. Оскільки $\mathcal{E}_k = kT$, то теплові нейтрони складають дуже малу частину нейтронів, які вилітають із сповільнювача та реєструються детектором. Тоді переріз захоплення нейтронів ядром атома залежить від їх енергії та змінюється за законом $\sigma_f \sim \frac{1}{\sqrt{T}} \sim \frac{1}{v}$.

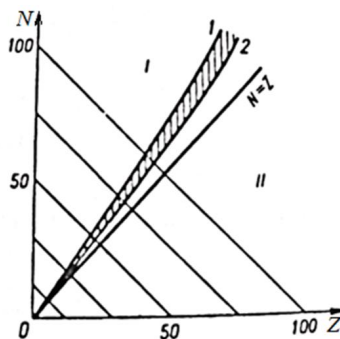


Рис. 140

Отже, зі збільшенням енергії $\mathcal{E}_k$ переріз σ_f зменшується відповідно до закону $-\frac{1}{v}$.

§134. Ланцюгова реакція в ядерних реакторах. Коефіцієнт розмноження нейтронів у ядерному реакторі. Реактори на швидких нейтронах (брідер)

Ядерні реакції поділу важких ядер нейтронами, внаслідок яких утворюється достатня кількість вторинних нейтронів і стає можливим самопідтримуючий процес поділу, називають *ланцюговими ядерними реакціями*.

Теорія ланцюгової реакції поділу була розроблена в 1939 р. Розглянемо основні положення цієї теорії у спрощеному вигляді. Нехай уранову мішень бомбардує певна кількість нейтронів. Через деякий проміжок часу τ ці нейтрони захоплюють ядра, які зазнають поділу. Завдяки цьому з'являється нове покоління нейтронів. Такий процес, що зумовлює розмноження нейтронів, може продовжуватись. Його характеризують *коефіцієнтом розмноження нейтронів k* , під яким розуміють відношення кількості нейтронів наступного покоління до кількості нейтронів попереднього покоління. Якщо за одне покоління кількість нейтронів n збільшується на δn , то

$$\frac{n + \delta n}{n} = k, \quad (134.1)$$

звідки маємо

$$\delta n = n(k - 1). \quad (134.2)$$

Якщо час життя одного покоління τ , то за час dt відбудеться $\frac{dt}{\tau}$ змін поколінь і відповідно зміна кількості нейтронів на

$$dn = \delta n \frac{dt}{\tau} = \frac{n(k - 1)}{\tau} dt. \quad (134.3)$$

Проінтегруємо вираз (134.3), одержимо

$$n = n_0 e^{\frac{k-1}{\tau} t}, \quad (134.4)$$

де n_0 - кількість нейтронів у момент часу $t = 0$.

З формули (134.4) випливає, що для $k < 1$ кількість нейтронів зменшується і *ланцюгова реакція згасає*. Тобто система називається *підкритичною* і в цьому випадку процес обривається. Якщо $k > 1$, то кількість нейтронів зростає за експоненціальним законом і *реакція має вибуховий характер*. Система називається *надкритичною*, у цьому випадку ланцюговий процес розвивається, його інтенсивність

зростає, відбувається вибух. Це реалізується в атомній бомбі. Якщо $k = 1$, то число нейтронів залишається на початковому рівні і ланцюгова реакція буде керованою. В системі ланцюговий процес проходить з незмінною інтенсивністю, яка називається критичною.

Коефіцієнт розмноження залежить від розмірів і форми. Мінімальні розміри активної зони, за яких можливе здійснення ланцюгової реакції, називається критичними розмірами, а відповідна мінімальна маса називається критичною масою. Для чистого $^{235}_{92}\text{U}$ ця маса займає об'єм кулі діаметром приблизно 15 см (критична маса - декілька кілограмів).

Такі реакції відбуваються в ядерних реакторах. Пристрій, в якому здійснюється керований ланцюговий процес ділення атомних ядер важких елементів, називається ядерним реактором (котлом). За класифікацією реактори бувають дуже різні.

Залежно від ядерного пального реактори класифікують так:

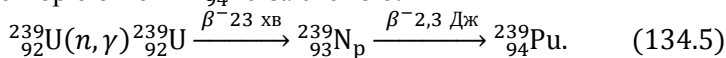
- реактори на природному урані (0,71% $^{235}_{92}\text{U}$);
- реактори на слабозбагаченому урані (1-2% $^{235}_{92}\text{U}$);
- реактори на високозбагаченому урані (90% $^{235}_{92}\text{U}$) тощо.

За енергією нейтронів, під дією яких відбувається поділ більшості ядер, розрізняють:

- реактори на теплових нейтронах;
- реактори на проміжних нейтронах;
- реактори на швидких нейтронах.

Розглянемо реактор на швидких нейтронах. Прикладом реакторів цього типу є *брідерні реактори*, в яких ядра атомів спаленого ядерного палива в процесі ланцюгового процесу перетворюються знову в ядра ізоотопів, що діляться. У цьому випадку кількість відновленого палива перевищує кількість палива на початку реакції (коефіцієнт відновлення більший одиниці).

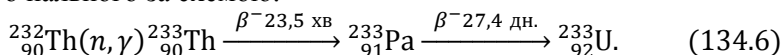
Нехай активна зона реактора заповнена ураном - збагаченим ізоотопом ^{235}U . Сповільнююач в такому реакторі і загальний об'єм реактора невеликий. В результаті ділення ядер ^{235}U утворюються швидкі нейтрони з енергією 1-2 МеВ. Ці нейтрони захоплюються ядрами ізоотопу ^{238}U і перетворюють їх в ядра ^{239}U , які шляхом β -розпаду перетворюються в $^{239}_{94}\text{Pu}$ за схемою:



Ізотоп $^{239}_{94}\text{Pu}$ за своєю можливістю до ділення не поступається ізоотопу ^{235}U . Таким чином, з витратою ізоотопу ^{235}U відбувається

утворення не менш цінного ядерного пального ^{239}Pu , яке може бути хімічно відділене від ^{238}U . На кожне ділення ядра ^{235}U може утворюватись в середньому до 1,5 ядра ^{239}Pu , так як число вторинних нейтронів, що випромінюються під час ділення ядра ^{235}U дорівнює 2,5, із них одне йде на підтримку ланцюгової реакції.

Поглинання нейтронів торієм призводить до утворення цінного ядерного пального за схемою:



В брідерних реакторах в якості теплоносія використовуються тільки рідкі метали (Na або K), так як вода буде виступати в ролі сповільнювача.

Цінність брідерних реакторів полягає в тому, що вони одночасно можуть бути джерелом ядерної енергії і чудовими агрегатами для отримання нових видів ядерного пального ^{239}Pu і ^{233}U . Реактори на швидких нейтронах дають можливість більш повніше використовувати природні запаси урану і торію, а не тільки ізоотп ^{235}U .

Лекція 38. ТЕРМОЯДЕРНІ РЕАКЦІЇ. ДОСЛІДЖЕННЯ КЕРОВАНИХ ТЕРМОЯДЕРНИХ РЕАКЦІЙ

§135. Термоядерні реакції синтезу і умови їх протікання. Опис кількох конкретних термоядерних реакцій з відміткою про їх енергетичний вихід.

§136. Вивільнення енергії у ядерних реакціях синтезу як фундаментальна проблема сучасної фізики. Обґрунтування цієї проблеми з позиції сучасних проблем народного господарства.

§137. Керовані термоядерні реакції в магнітних пастках. Критерій фізичного порогу термоядерної реакції. Критерій Лоусона.

§138. Загальна схема лазерного термоядерного і холодного синтезу атмосфери ^2H і ^3H .

[5. §5.1-§5.6; 6. §7.5, §8.1-§8.4; 9. §6.4]

§135. Термоядерні реакції синтезу і умови їх протікання. Опис кількох конкретних термоядерних реакцій з відміткою про їх енергетичний вихід

Злиття атомних ядер не відбувається за звичайних умов, так як атомні ядра, що мають додатні заряди $+Z_1e$ і $+Z_2e$, зазнають великих сил кулонівського відштовхування. Енергія такого відштовхування дорівнює:

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (135.1)$$

За наближення двох ядер з масовими числами A_1 і A_2 на відстані $R_{1,2} = 1,4 \cdot 10^{-15} \left(A_1^{\frac{1}{3}} + A_2^{\frac{1}{3}} \right)$ м починає проявлятися ядерна взаємодія (притягання нуклонів), за своєю величиною переважаючи електростатичне відштовхування ядер. В цьому випадку два ядра A_1 і A_2 зливаються в одне з великою енергією зв'язку і відбувається вивільнення енергії. Якщо ж ядра A_1 і A_2 знаходяться один від одного на відстані $r > R_{12}$, то між ними діють тільки сили електростатичного відштовхування. Таким чином, навколо даного ядра A_1 по відношенню до другого ядра A_2 (і навпаки) існує потенціальний бар'єр висотою $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{12}}$, який і повинні подолати найближчі ядра (рис. 141). На рисунку 141 відображено потенціальний бар'єр і тунельний ефект у злитті ядер.

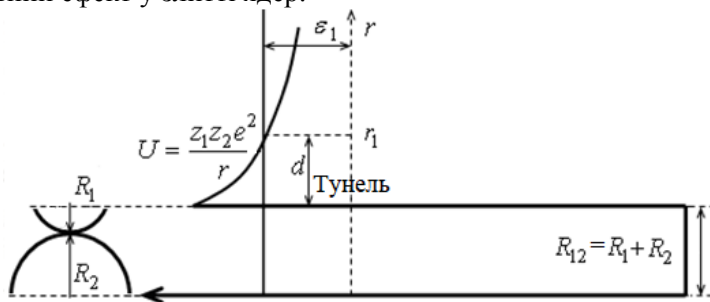


Рис. 141

Друге ядро A_2 , знаходиться в полі ядра A_1 і має найбільшу ймовірність тунельно пройти через потенціальний бар'єр і за умови $E < \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{12}}$. Із зростанням енергії відносно руху ядер A_1 і A_2 ширина бар'єра зменшується, а ймовірність тунельного наближення різко зростає. Енергія відносного руху ядер може бути збільшена шляхом підвищення температури. У цьому випадку підвищення температури призведе до швидкого зростання ймовірності тунельного наближення

ядер A_1 і A_2 . Суть ядерних реакцій злиття в тому, що «оголені» атомні ядра за рахунок своєї кінетичної енергії під час зіткнення долають потенціальний бар'єр і підходять один до одного на таку близьку відстань R_{12} , що під дією ядерних сил зчеплення вони зливаються в єдину систему - нове, більш складне ядро. Оскільки необхідна для злиття ядер кінетична енергія підводиться до них як теплова енергія, то такі ядерні реакції і називаються *термоядерними реакціями злиття (синтезу)*.

§136. Вивільнення енергії у ядерних реакціях синтезу як фундаментальна проблема сучасної фізики. Обґрунтування цієї проблеми з позиції сучасних проблем народного господарства

Отже, *термоядерні реакції* - це реакції синтезу атомних ядер, що ефективно протікають за дуже високих температур (десятки і сотні мільйонів градусів) і характеризуються властивостями до підтримки цих температур за рахунок великого енерговиділення.

Між кінетичною енергією частинки і температурою існує залежність:

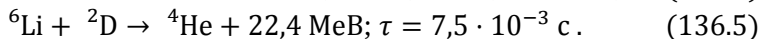
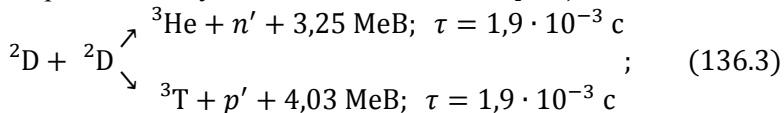
$$T_{\text{град.}} = 1,16 \cdot 10^4 \mathcal{E} \text{ еВ.} \quad (136.1)$$

Якщо кінетична енергія, необхідна для подолання кулонівського бар'єру, відома, то із співвідношення (136.1) можна визначити температуру, за якої буде протікати термоядерна реакція злиття даних ядер.

Висота потенціального бар'єру у випадку наближення двох протонів складає $\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \approx 1,03 \text{ MeV}$. Підставляючи $\mathcal{E} \approx 10^6 \text{ еВ}$ в співвідношення (136.1), отримаємо:

$$T = 1,16 \cdot 10^4 \cdot 10^6 = 1,16 \cdot 10^{10} \text{ град.} \quad (136.2)$$

Прикладами термоядерних реакцій є наступні реакції (τ - тривалість реакції в секундах для $T \sim 20 \times 10^6 \text{ град.}$):



Отже, для того щоб протікала термоядерна реакція злиття легких ядер, необхідно утворити високу температуру порядку

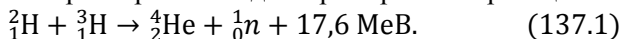
декількох десятків мільйонів і забезпечити, щоб кількість енергії, що виділяється у термоядерній реакції перевищувала енергетичні затрати. Якщо енергетичні затрати будуть перевищувати енергію, що виділяється, то температура понизиться і термоядерна реакція припиниться.

В цілях промислово-технічного використання термоядерної енергії злиття необхідно забезпечити керовані термоядерні реакції, які можуть бути викликанні за волею людини і інтенсивність протікання яких могла б керуватися людиною. *Керуючим реактором злиття* будемо називати такий пристрій, в якому за волею людини можуть протікати керовані термоядерні реакції синтезу.

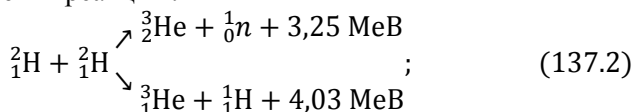
В земних умовах реакції синтезу поки що здійснюються лише у вигляді термоядерних вибухів. Отримання керованої реакції синтезу представляє собою складну науково-технічну задачу. Протягом трьох останніх десятиліть її вирішенню приділялася велика увага, і вже отриманий цілий ряд багатообіцяючих результатів. Повне керування реакціями синтезу дасть людству практично невичерпне джерело енергії. До того ж використання таких реакцій не буде супроводжуватись забрудненням навколишнього середовища, так як в них на відміну від реакцій поділу не утворюються радіоактивні відходи.

§137. Керовані термоядерні реакції в магнітних пастках. Критерій фізичного порогу термоядерної реакції. Критерій Лоусона

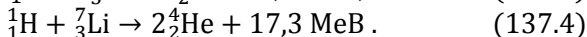
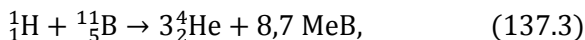
Як вже зазначалося вище, перебіг термоядерних реакцій залежать від температури. За дуже високих температур речовина може існувати лише у вигляді повністю іонізованої плазми і проблеми здійснення керованого термоядерного синтезу тісно пов'язані з проблемами фізики плазми. Вони є дуже складними, тому що сьогодні всі надії на керований термоядерний синтез (КТС) пов'язуються з єдиним перетворенням з дейтерій-тритієвої реакції:



В деякій більш віддаленій перспективі планується освоїти КТС на дейтерій-дейтерієвих реакціях:



В майбутньому можуть використовуватися і реакції термоядерного поділу:



Для оцінки параметрів плазми, в якій можлива стаціонарна термоядерна реакція, зауважимо, що число елементарних актів синтезу в одиниці об'єму дорівнює:

$$N = \alpha(T) n_D n_T \tau. \quad (137.5)$$

де $n_D n_T$ - концентрація дейтерію і тритію; τ - час утримання плазми в гарячому стані; $\alpha(T)$ - функція температури, вигляд, якої визначається енергетичною залежністю перерізу реакції (137.1) і умовами процесів термообміну в плазмі.

В одному акті синтезу виділяється енергія Q , а в одиниці об'єму за час τ - енергія QN , яку можна перетворити в електричну енергію

$$W_{\text{ел}} = \eta QN = \eta Q \alpha(T) n_D n_T \tau, \quad (137.6)$$

де η - коефіцієнт перетворення (коефіцієнт корисної дії).

З іншої сторони, на розігрів розглядуваної кількості плазми треба затратити теплову енергію

$$W_{\text{тепл}} = 2 \frac{3}{2} kT (n_D + n_T), \quad (137.7)$$

де множник 2 враховує те, що в плазмі поряд з ядрами (іонами) присутні в такій же кількості електрони.

Підставляючи вирази (137.6) і (137.7) в умову енергетичної зручності процесу в цілому $W_{\text{ел}} > W_{\text{тепл}}$ ми для необхідного часу утримання плазми, отримаємо:

$$\tau > \frac{3kT(n_D + n_T)}{\alpha(T)\eta Q n_D n_T} = \frac{3kTn}{\alpha(T)\eta Q n_D (n - n_D)}, \quad (137.8)$$

де $n = n_D + n_T$ - повна концентрація ядерних частинок.

Очевидно, що права частина мінімальна для $n_D = \frac{n}{2}$. У цьому випадку умову виразу (137.8) можна переписати так

$$n\tau > \frac{12kT}{\alpha(T)\eta Q} = f(T). \quad (137.9)$$

Із збільшенням T функція $f(T)$ в області низьких температур спадає (через зростання перерізу реакції), а в області дуже високих температур вона зростає (через наявність співмножника T). За умови $T = T_0$ функція $f(T)$ досягає мінімуму. Зрозуміло, що температура T_0 найбільш сприятлива для здійснення КТС. Детальний аналіз

поведінки функції $\alpha(T)$ показує, що для реакції (137.1)

$$T_0 \cong 2 \cdot 10^8 \text{ К}. \quad (137.10)$$

Якщо взяти $\eta = \frac{1}{3}$ (реальне значення коефіцієнта перетворення внутрішньої енергії в електричну) і врахувавши, що $Q = 17,6 \text{ МеВ}$, то (мінімальне) значення $f(T_0)$ стає рівним у цьому випадку приблизно $10^{20} \frac{\text{с}}{\text{м}^3}$. В результаті приходимо до наступної умови стаціонарного протікання дейтерій-тритієвої реакції (137.1):

$$n\tau > 10^{20}, \quad (137.11)$$

де час τ вимірюється в секундах, а концентрація n - в м^{-3} .

Умови типу (137.10), (137.11) і складають зміст відомого *критерію Лоусона*, що виражає умову виникнення самопідтримуючої термоядерної реакції або умову запалювання термоядерної реакції. Для дейтерій-дейтерієвих реакцій (137.2) він виглядає наступним чином:

$$T_0 \cong 10^9 \text{ К}, \quad (137.12)$$

$$n\tau > 10^{20}. \quad (137.13)$$

Видно, що здійснення КТС на їх основі значно складніше, ніж на основі дейтерій-тритієвої реакції.

Отже, для отримання керованої термоядерної реакції необхідно в першу чергу мати плазму з температурою в сотні мільйонів градусів.

В наш час проблему розігріву плазми до необхідних температур відповідно до виразу (137.10) можна вважати в принципі розв'язаною.

Головна складність в тому, щоб задовольнити умову (137.11). Тут можливі два шляхи. Один із них - утримання протягом достатньо довгого часу τ високотемпературної плазми з невеликою концентрацією n ядерних частинок за порівняно невисокого тиску $P = nkT$. Другий шлях - це дуже швидкий розігрів висококонцентрованого термоядерного пального (великі значення n) в надії на те, що реакція синтезу здійснюється за час природного розльоту утвореної плазми (малі значення τ). Практичні розробки ведуться як в одному, так і в іншому напрямках.

Для нагрівання дейтерій-тритієвої плазми до температури близько 10^8 К можуть бути використані такі способи:

1. Виділення джоулевого тепла у разі пропускання електричного струму через плазму.

2. Інжекція в плазму пучків нейтральних частинок високих

енергій.

3. Нагрівання високочастотним електромагнітним полем.
 4. Стискання плазми у разі проходження через неї електричного струму (пінч-ефект).
 5. Нагрівання лазерним випромінюванням високої потужності.
 6. Нагрівання інтенсивними електронними пучками.
 7. Нагрівання пучками прискорених важких іонів.
- Наведені методи нагрівання плазми до термоядерних і вищих температур технічно здійсненні.

§138. Загальна схема лазерного термоядерного і холодного синтезу атмосфери ${}^2_1\text{H}$ і ${}^3_1\text{H}$

Розглянемо проблему холодного ядерного синтезу. Для суспільства ця історія почалася 23 березня 1989 року, коли на прес-конференції в університеті штату Юта (США) два електрохіміка, Мартін Флейшман і Стенлі Понс, повідомили про відкриття ними «холодного ядерного синтезу» (ХЯС). З висловлювань авторів за час електролітичного насичення дейтерієм (із важкої води D_2O) паладієвого електрода за кімнатної температури вони спостерігали надлишок тепла (декілька ват на 1 см^3) на електроді, що в 3-8 разів перевищував затрачену енергію, потік нейтронів і гамма-квантів, а також підвищення їх концентрації в електроліті. Всі ці факти інтерпретувались як свідчення, того що в електроді протікають реакції злиття ядер дейтерію



У цьому випадку гамма-кванти могли виникати в оточуючому електролітичну комірку охолоджувачі в результаті реакції захоплення нейтронів



Оскільки реакції проходили за кімнатної температури, явище отримало назву «холодного» ядерного синтезу на відміну від «гарячого», що відбувається за температур $10^7 - 10^8\text{ K}$ в надрах Сонця, зір, а також в лабораторіях на термоядерних установках і прискорювачах.

Флейшман і Понс повідомили, що термоядерна реакція протікає в простій комірці для електролізу (рис. 142). Паладієвий електрод, оточений спіраллю із платини, поміщали у важку воду, де водень

замінений дейтерієм. Під час проходження електричного струму молекули важкої води дисоціюють і паладій насичується дейтерієм. Атоми дейтерію проникають в кристалічну ґратку паладію. Під час їх злиття виділяється енергія, утворюються нейтрони і ядра гелію.

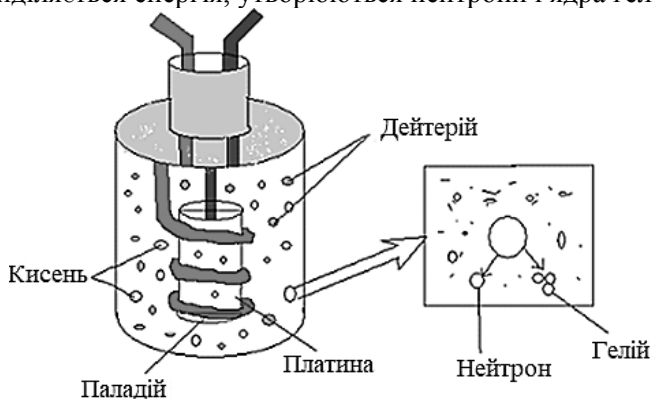


Рис. 142

Раніше серед методів реалізації КТС були запропоновані імпульсні методи, до яких можна віднести лазерний КТС, запропонований в 1964 році Крохіним і Басовим. В реакції повинна приймати участь крупинка суміші дейтерію і тритію, що знаходиться спочатку за температури нижче 11 К (точки тверднення). Для розігріву крупинки до $T \sim 10^8$ К її необхідно надати енергію, яку можна розрахувати за формулою

$$E = \frac{4\pi}{3} R^3 n \cdot 2 \frac{3}{2} kT. \quad (138.4)$$

Виходячи із виразу (138.4), вона становить:

$$E \sim 10^6 - 10^7 \text{ Дж},$$

причому час передачі повинен бути $\tau_{\max} = 9$ с. Це можливо за допомогою потужних сучасних лазерів.

Лекція 39. ЕЛЕМЕНТАРНІ ЧАСТИНКИ

§139. Елементарні частинки та їх основні характеристики. Класифікація елементарних частинок.

§140. Закони збереження у перетвореннях елементарних частинок.

§141. Початкові відомості про структуру нуклонів.

§142. Поняття про систематику елементарних частинок.
Гіпотеза про кварки.

[4. Р.2-Р.4; 5. §1.7, §1.8, §3.11; 6. §2.6; 7. §1-§10; 9. §7.1-§7.4]

§139. Елементарні частинки та їх основні характеристики. Класифікація елементарних частинок

До елементарних частинок належать: електрон, протон, нейтрон, фотон, π -мезон, μ -мезон, k -мезон, нейтрино і велика кількість гіперонів (їх понад 30). Резонанси надзвичайно нестабільні частинки з коротким життям, одержують в процесі взаємодії інших частинок.

Маса елементарних частинок може бути власною і невласною.

Власна маса - це така маса, яку вона має в інерціальній системі відліку що перебуває в стані спокою (m_0).

Невласна маса - $m = \gamma m_0$, в довільній системі відліку

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Маса виражає інерціальні властивості, з іншого боку - вона є джерелом гравітації - визначає з якою силою діє якесь стороннє джерело на цю частинку. Інакше кажучи, маса елементарної частинки виступає як її гравітаційний заряд. Масу m_0 визначають на основі інваріанту енергії та імпульсу:

$$W^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^4.$$

Друга характеристика - це її *електричний заряд*

$$\vec{F} = e(\vec{E} + [\vec{v}\vec{B}]).$$

Дуже важливою характеристикою - є *спін* - це власний кінетичний момент - момент імпульсу частинки. Як правило цей спіновий момент виражається в одиницях $\hbar$. Цілий спін мають *частинки Бозе*, тобто *бозони*, а з дробовим спіном *частинки Фермі-Дірака* - *ферміони*.

Четвертою характеристикою частинок є *час їх життя*. П'ять елементарних частинок і їх античастинок є стабільними, тобто не зазнають спонтанного розпаду. Нейтрино і антинейтрино електронного походження ($\nu_e, \bar{\nu}_e$); нейтрино і антинейтрино μ -оного походження ($\nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$); електрон, позитрон (e^-, e^+); γ -фотон; протон, антипротон ($p, \bar{p}$). Решта частинок це нестабільні частинки, час життя

їх триває в межах від $10^{-6} - 10^{-27}$ с.

Власний час τ життя частинок - це час життя в тій системі відліку, відносно якої частинка перебуває в стані спокою

$$t = \gamma \tau,$$
$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Крім цих чотирьох характеристик є ще ряд квантових характеристик, які відповідають квантовим властивостям частинки:

- баріонний заряд (баріонне число);
- лептонний заряд;
- ізотопічний спіні;
- дивність;
- парність.

До першого класу відносяться γ -фотони; другий клас - легкі частинки - лептони; третій - мезони (середньої маси); четвертий масивні частинки - баріони

$$m_e = 0,5 \text{ MeV} = 0,5 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж};$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ Дж};$$

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}.$$

Щодо стабільності лептонів (нейтрино і антинейтрино), то перші три групи стабільні, а час життя для μ^- і μ^+ становить 10^{-6} с.

До мезонів належать всі три піони (π^+, π^-, π^0). Маса заряджених піонів однакова $m = 140 \text{ MeV}$, а для незарядженого менша - 135 MeV . Характерно, що ці π -мезони мають спіні рівний нулю (k^+ -мезон, k^- -мезон, k^0 -мезон, $\tilde{k}^0$ -мезон) (k^+ і k^- - це частинка і античастинка), η -мезон. Всі мезони нестабільні, час життя порядку $10^{-8} - 10^{-10}$ с.

Баріони - $p, \tilde{p}$ (протон, антипротон); $n, \tilde{n}$ (нейтрон, антинейтрон).

Гіперони. До них належать Λ^0 (ламда нуль гіперон), $\tilde{\Lambda}^0$ (ламда нуль антигіперон); Σ^0 (сигма нуль гіперон), $\tilde{\Sigma}^0$ (сигма нуль антигіперон), Σ^+ (сигма плюс гіперон), Σ^- (сигма мінус гіперон); Ξ^0 (ксі нуль гіперон), $\tilde{\Xi}^0$ (ксі нуль антигіперон), Ξ^-, Ξ^+ (ксі $\pm$ гіперон); Ω^- (омега мінус гіперон) і Ω^+ (омега плюс гіперон). Для них

$$Q = \pm e; Q = \pm 1.$$

За винятком протона p і антипротона $\tilde{p}$ всі інші частинки нестабільні - час життя $10^{-10} - 10^{-11}$ с. Виняток нейтрон - живе

порядку 1000 с. Всі ці чотири класи частинок (біля 30) називаються *фундаментальними частинками*.

Але ще є більше 200 резонансів - частинки, які не входять до фундаментальних $\pi^+ - p$. Проявляються й інші резонансні процеси. Так для взаємодії $\pi - k$, $\pi - \Lambda^0$ спостерігаються резонанси. *Резонанси* - короткоживучі збуджені стани адронів. Кожна із сукупності частинок (резонанс) веде себе як єдина елементарна частинка (квазічастинка). Більшість відомих частинок є резонансами. Час життя резонансів: $10^{-22} - 10^{-24}$ с, тому їх неможливо спостерігати у вигляді треків на детекторах.

Формально резонанси відрізняються від частинок тільки меншим часом життя. Кожний резонанс характеризується декількома способами розпаду. Чим більша ефективна маса резонансу, тим більше у нього шляхів (каналів) розпаду.

Резонанси нестабільні відносно сильних взаємодій. Звичайні елементарні частинки стабільні відносно сильних взаємодій і розпадаються способом слабких взаємодій або способом електромагнітних взаємодій, а деякі з них (γ, e^-, ν , вільний протон і їх античастинки) стабільні відносно всіх видів взаємодій.

Усі сильно взаємодіючі частинки і резонанси називаються *адронами* (великими частинками). Їх кількість дуже велика.

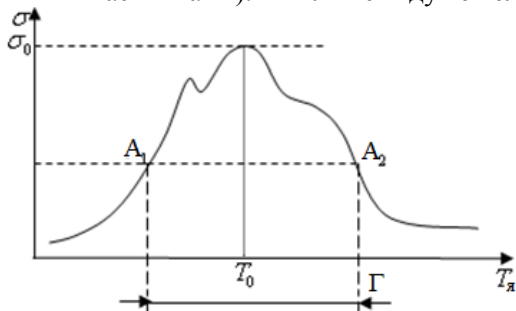


Рис. 143

Опис резонансів можна спостерігати на рисунку 143. Для резонансів виконується умова:

$$\Gamma \tau \geq \hbar,$$

де Γ - енергетична ширина резонансу; τ - час життя резонансів.

Виходячи з цієї умови і знаючи енергетичну ширина резонансу можна знайти час життя резонансів:

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}.$$

Як приклад, експериментально була визначена ширина резонансу, що рівна $\Gamma = 11,9$ МеВ. Ширина резонансу виражається в одиницях енергії, відповідає його середньому часу життя. Резонанси аналогічні збудженим станам атома: коли електрон поглинає енергію та переходить на інший вищий енергетичний рівень.

§140. Закони збереження у перетвореннях елементарних частинок

Закон збереження і перетворення енергії має місце для всіх процесів перетворення елементарних частинок. Тоді автоматично має місце закон збереження імпульсу:

$$W^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^4,$$

а також закон збереження моменту імпульсу - кінетичного моменту імпульсу:

$$a + B \rightarrow c^* \rightarrow g + h;$$

$$\vec{L}_a + \vec{L}_b + \vec{L}_{ab} = \vec{L}_g + \vec{L}_h + \vec{L}_{gh},$$

де L_{ab} - загальний орбітальний момент.

Але крім цих законів є ще закони збереження для перетворення елементарних частинок.

Закон збереження ядерного заряду або ядерної речовини.

Виявилось, що ядерна речовина у всіх взаємодіях і для всіх перетворень залишається незмінною. Різниця між числом баріонів, антибаріонів для всіх ядерних перетворень залишається незмінною

$$\sum_i N_i - \sum_k \tilde{N}_k = \text{const.}$$

Ввели таку характеристику як баріонний заряд B , який має такі значення -1, 0, +1. Для баріонів +1, для антибаріонів -1, для нейтронів (мезонів) - 0.

Закон збереження баріонного заряду полягає в тому, що алгебраїчна сума баріонних чисел до і після процесів перетворення елементарних частинок однакова.

Для того, щоб можна було записувати більш впевнено реакції частинок ввели лептонний заряд (для лептонів). Значення лептонних зарядів (чисел) для елементарних частинок наведено у таблиці 16:

Таблиця 16

Лептонний заряд електронний	Лептонний заряд мюонний
$l_e = +1; e^-, \nu_e$ $l_e = -1; e^+, \bar{\nu}_e$	$l_\mu = +1; \mu^-, \nu_\mu$ $l_\mu = -1; \mu^+, \bar{\nu}_\mu$
Для всіх інших частинок $l_e = l_\mu = 0$	

Закон збереження лептонного заряду: для ізолюваної системи елементарних частинок алгебраїчна сума лептонних зарядів залишається незмінною

$$\begin{aligned}
 n &\rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e; \\
 0 &= 0 + 1 + (-1); \\
 \pi^- &\rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu; \\
 0 &= 1 + (-1).
 \end{aligned}$$

Кожній елементарній частинці з набором чотирьох зарядових чисел Q, B, l_e, l_μ відповідає дзеркальна частинка - античастинка для якої всі ці чотири числа мають протилежні знаки. За зміни знаків заряду цих чотири числа переходять самі в себе.

Закон збереження ізотопічного спіну.

Розвиток ядерної фізики призвів до виявлення нового сімейства частинок. І щоб їх розпізнавати ввели нову назву - *ізотопічний спін*. Ізотопічний спін групує елементарні частинки в сімейства. Його позначають буквою T . Ізотопічний спін - це чисто математична величина. Електрон може перебувати в двох спінових станах

$$s = \pm \frac{1}{2}.$$

Відомо, що частинка, що має спін s , може мати в просторі $2s + 1$ орієнтацій спіна відносно виділеного зовнішнім магнітним полем напрямком:

$$\begin{aligned}
 2s + 1 &= 2; \\
 s &= \frac{1}{2}.
 \end{aligned}$$

Відкриття π -мезона з його трьома зарядовими станами π^+, π^0, π^- дозволило Кеммеру поширити поняття ізотопічного спіну і на π -мезони.

Так як нуклонні частинки і π -мезони об'єднуються в зарядові сімейства: нуклони - в дуплет; π -мезони в триплет.

Тобто маємо:

- для сімейства нуклонів:

$$2T + 1 = 2;$$

- для сімейства π -мезонів:

$$2T + 1 = 3.$$

Протон і нейтрон буде мати відповідно спіни $\left(\frac{1}{2}\right)$ і $\left(-\frac{1}{2}\right)$, тобто

$$p \rightarrow T = \frac{1}{2},$$

$$n \rightarrow T = -\frac{1}{2}.$$

Вводиться поняття проекції ізотопічного спіну T_3 в просторі ξ , η , ζ ізотопічного спіну (рис. 144). На рисунку 144 букви читаються так: η (ета); ξ (ксі); ζ (дзета). Тоді проекція ізоспіну $T_3 = +\frac{1}{2}$ відповідає протону, а проекція $T_3 = -\frac{1}{2}$ відповідає нейтрону. Перехід від нейтрона до протона формально означає зміну проекції ізотопічного спіну від $-\frac{1}{2}$ до $+\frac{1}{2}$.

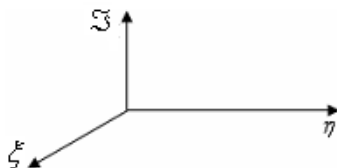


Рис. 144

Через вказані значення проекції ізотопічного спіну T_3 і баріонний заряд B легко виражається електричний заряд $\frac{Q}{e}$ частинки в одиницях елементарного заряду за наступною формулою:

$$\frac{Q}{e} = T_3 + \frac{B}{2}.$$

Для протона:

$$\frac{Q}{e} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.$$

Для нейтрона:

$$\frac{Q}{e} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0.$$

Нуклон - це дуплет в просторі ізотопічного спіну і характеризується проекцією: $\frac{1}{2}$ для протона і $-\frac{1}{2}$ для нейтрона. Прикладом триплета в ізотопічному просторі можна назвати сімейство піонів. Ізотопічний спін цієї сім'ї 1, а їх проекції

$$\begin{aligned}\pi^+ &+ 1; \\ \pi^- &- 1; \\ \pi^0 &0;\end{aligned}$$

k -они мають ізотопічний спіні $\frac{1}{2}$; Λ -гіперон має нульовий спіні.

Розглянемо детальніше закон збереження ізотопічного спіну. Цей закон має місце тільки для частинок, які мають сильну фундаментальну взаємодію. Тому він виражає інваріантність сильної взаємодії. Інакше кажучи, закон збереження ізотопічного спіну рівнозначний тотожності всіх членів частинок відносно сильної взаємодії. Закон збереження ізотопічного спіну, означає їх зарядову незалежність у випадку ядерних сил (або їх зарядову симетрію). Кількісно закон збереження ізотопічного спіну можна сформулювати на основі розпадів частинок, що протікають під впливом сильних взаємодій.

Сформулюємо даний закон у вигляді означення: *арифметичні суми ізотопічних спінів в початковому і в кінцевому станах системи елементарних частинок повинні бути обидві або цілими, або напівцілими (дробовими)*. Математично це виражається для даної системи так:

$$\Delta T = 0, \Delta T_3 = 0.$$

Для слабких взаємодій він втрачає свою силу.

Дивність. Закон збереження дивності.

Введення дивності як квантової характеристики, виявилось потрібним коли велись дослідні процеси народження і розпаду K -мезонів. Причому це народження відбувається для сильних взаємодій. Процес розпаду триває 10^{-12} с і характеризується слабкою взаємодією. Це призвело до введення нового квантового числа - *дивності*. Для того, щоб узгодити закон збереження електричного заряду, баріонного заряду, ізотопічного спіну ввели дивність S . Для нуклонів і піонів $S = 0$, для $\Lambda^0, \Sigma^+, \Sigma^-$ - (+1), для їх античастинок - (-1).

Закон збереження дивності частинок читається так: *алгебраїчна сума дивностей до і після взаємодії перетворення частинок залишається незмінною*.

Закон збереження дивності виконується для сильних і електромагнітних взаємодій, а для слабких взаємодій величина S змінюється на одиницю.

Знаючи значення ізотопічного спіну T_3 , баріонного заряду B і

дивності S можна легко знайти електричний заряд частинок. Запишемо вираз, який справедливий для всіх елементарних частинок:

$$Q = \frac{1}{2}B + T_3 + \frac{1}{2}S.$$

Для гіперзаряджених елементарних частинок має місце вираз:

$$B + S = Y.$$

Дана величина отримала назву *гіперзаряду*.

Запишемо ще один вираз, що буде представляти ту саму формулу тільки в іншому вигляді:

$$Q = T_3 + \frac{1}{2}Y.$$

Останній вираз запропонований Гелл-Манном і Нішідзіме, де саме електричний заряд визначається таким загальним співвідношенням. Вони також запропонували класифікувати частинки за зарядовими мультиплетами (дулет, триплет, синглет). Систематика Гелл-Манна і Нішідзіме дозволила передбачити ряд невідомих на той час частинок (Σ^0 , Ξ^0 , K^0), які пізніше були виявлено експериментально. Не дивлячись на недоліки, систематика Гелл-Манна і Нішідзіме володіє великою евристичною цінністю. Однак викликає здивування той факт, що лептони ($\nu_e, \nu_\mu, e^-, \mu^-$) і фотони не знаходять місця в цій систематиці.

§141. Початкові відомості про структуру нуклонів

Дослідження нуклонів велося в лабораторіях США і СРСР. В США опромінення нуклонів велося електронами, а в СРСР опромінювали нуклони π -мезонами. У цих дослідженнях прийшли до єдиного висновку. Відстань, на яку можуть віддалятися π -мезони - $\frac{\hbar}{m_\pi c}$, а час протягом, якого можуть існувати ці π -мезони: $\frac{\hbar}{m_\pi c^2} \frac{1}{c}$, де відстань прямує до $1,4 \cdot 10^{-15}$ м, а час $\sim 10^{-23}$ с і їх називають *віртуальними π -мезонами*.

Таким чином, навколо ядра нуклона (навколо «голого» нуклона) виникає хмара (атмосфера) із π -мезонів. Окрім π -мезонів, нуклони також взаємодіють з K -мезонами і гіперонами, хоча величина цієї взаємодії менша. Основним віртуальним процесом для цієї взаємодії є віртуальне випромінювання (поглинання) K -мезона з утворенням гіперона Y у відповідності до закону збереження дивності, тобто процес

$$N \rightleftharpoons Y + K.$$

Навколо гіперона, який утворився, віртуальні K -мезони індуюють (створюють) хмару (атмосферу), розмірами $r_k = \frac{\hbar}{m_K c} = \frac{m_\pi}{m_K} r_\pi \approx 0,37 r_\pi$. Окрім π -мезонів, можливе утворення нуклон-antinуклонних пар

$$N \rightleftharpoons N + \tilde{N} + N.$$

Відповідно, навколо центру «керна» нуклона (розмірами $\sim 10^{-16}$ м) існує система оболонок із нуклон-antinуклонних пар, K -мезонів, пар π -мезонів (піонів) і віртуальних фотонів, що зумовлюють електромагнітну взаємодію (рис. 145).

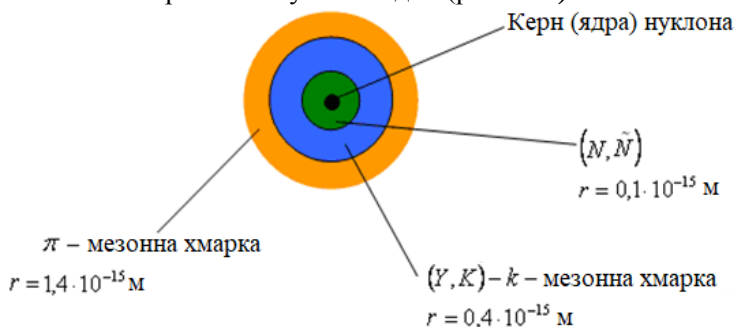


Рис. 145

Мабуть, аналогічну структуру необхідно приписати й електрону. Навколо центра електрона є система оболонок, що утворені парами частинок і античастинок (фотонів, електронів - позитронів, піонів, нуклон-antinуклонів) Однак через мале значення константи взаємодії $\frac{e^2}{\hbar c}$ оболонки мають дуже малу густину.

Проте константа сильної взаємодії для нуклонів $\frac{g^2}{\hbar c} \sim 10 - 15$, приблизно в тисячу разів більша $\frac{e^2}{\hbar c}$, у цьому випадку мезонна атмосфера нуклона не така прозора як в електрона.

З розвитком електронної теорії (1909 р.) стала формуватися думка про те, що електрон подібний до кульки, яка має деякі розміри ($r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} \approx 2,81 \cdot 10^{-15}$ м). Перед фізиками постало запитання, як розподіляється електричний заряд всередині цієї кульки. Теоретична формула за якою можна розрахувати цей заряд має вигляд:

$$\Delta q = \rho 4\pi r^2 \Delta r,$$

де ρ - об'ємна густина заряду в точці з радіусом r .

В нуклоні безперервно відбуваються вищезазначені віртуальні процеси випромінювання (поглинання). Нуклон представляється у вигляді:

- 1) $N + (N + \tilde{N})$;
- 2) $Y + K$;
- 3) $N + \pi$.

Зміна цих різних аспектів - образів відбувається дуже швидко і їх неможливо спостерігати як самостійні стани. Мабуть, ці віртуальні процеси є причиною виникнення аномального магнітного моменту нуклонів.

Експерименти показують, що нуклони не є точковими, а мають досить складну структуру. З цього приводу ведуться роботи з дослідження структури нуклонів за допомогою потужного синхрофазатрона. Одним із способів вивчення структури протона є дослідження пружного розсіювання π -мезонів великої енергії (7 БеВ) на протонах:

$$\pi + p \rightarrow p + \pi.$$

Група американських фізиків вивчає структуру нуклонів шляхом дослідження пружного розсіювання електронів на нуклонах. Розподіл електричного заряду показано в протоні (рис. 146) та в нейтроні (рис. 147), які отримані в Стенфорді (США). Протону і нейтрону властиві одні й ті ж заряджені мезонні хмари. В протоні ці хмари додаються, а в нейтроні гасять одна одну.

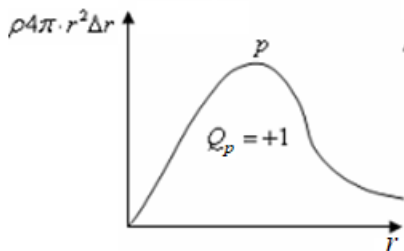


Рис. 146

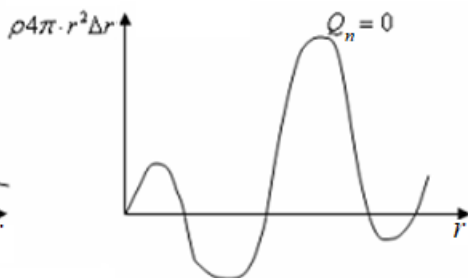


Рис. 147

У дослідженні структури нуклонів та погодження деяких деталей можна зробити певні уточнення:

- 1) елементарні частинки - це не точкові утворення, а вони мають кінцеві розміри і дуже складну структуру;
- 2) немає ізольованих «голих» елементарних частинок,

можливо, нуклон не може існувати без π -мезонів і інших мезонів - елементарна частика в сучасному уявленні починає виступати у вигляді складної композиції багатьох інших частинок;

3) проблема ядерних сил (ймовірно, і слабких взаємодій) тісно поєднується з проблемою структури нуклонів (елементарних частинок).

Виходячи з цього факту, що існує структура елементарних частинок, то ми можемо перейти до їх кваркової структури.

§142. Поняття про систематику елементарних частинок. Гіпотеза про кварки

У 1964 р. М. Гелл-Манн і Дж. Цвейг висловили гіпотезу, за якою всі мезони і баріони побудовані з найпростіших частинок, їх назвали *кварками*.

Поняття про систему елементарних частинок - це відома гіпотеза Геомана і Неймана. Згідно цієї гіпотези всі частинки повинні складатися з трьох основних кварків. Кварки є природні елементарні частинки, які уже не розкладаються, їх позначають наступним чином: u -кварк; s -кварк; d -кварк.

Згідно цієї гіпотези, протон наприклад, складається з двох u -кварків і одного d -кварка; нейтрон - двох d -кварків і одного u -кварка. Заряди цих кварків є дробовими і рівні:

$$Q(u) = \frac{2}{3}; Q(s) = -\frac{1}{3}; Q(d) = -\frac{1}{3}.$$

Баріонний заряд для всіх цих трьох кварків дорівнює $\frac{1}{3}$; дивність:

$$S(u) = 0; S(s) = -1; S(d) = 0;$$

проекції ізотопічного спіну:

$$T_3(u) = \frac{1}{2}; T_3(s) = 0; T_3(d) = -\frac{1}{2}.$$

Система цих частинок може бути представлена діаграмою, яка зображена на рисунку 148.

Відкриття таких адронів (підпорядковуються сильним взаємодіям) як D^- ; ψ -мезони, призвели до введення четвертого типу кварків - c арм, що означає чарівний. Позначається літерою c (c -кварк). У 1974 році майже одночасно двома командами: одна під керівництвом Бертона Ріхтера, а інша в Брукгейвенській національній лабораторії під керівництвом Семюела Тінга c -кварк було відкрито та зареєстровано об'єднання чарівних кварка і антикварка в мезон.

На той час система Геомана включала чотири кварки. Всі елементарні частинки склалися з цієї групи кварків.

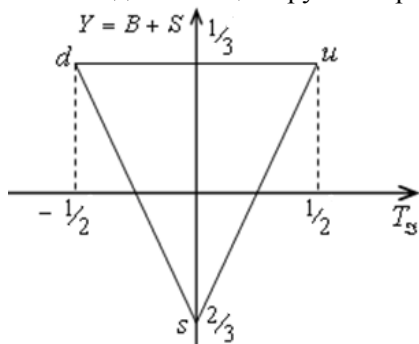


Рис. 148

У 1977 році під керівництвом Леона Ледермана був відкритий *b*-кварк (*beauty*), що означає красивий. Це стало індикатором існування топ-кварка; без нього красивий кварк був би без партнера. Тим не менше, топ-кварк не спостерігався до 1995 року. Він мав набагато більшу масу, ніж раніше очікувалось.

У 1995 році був відкритий *t*-кварк (*true*), який називають істинним.

Всього відомо шість типів кварків:

u-кварк або верхній (*up*) кварк;

d-кварк або нижній (*down*) кварк;

c-кварк або зачарований (*charm*) кварк;

s-кварк або дивний (*strange*) кварк;

b-кварк або красивий (*beauty*) кварк;

t-кварк або істинний (*true*) кварк.

Кварки мають незвичайний дробовий електричний заряд, кратний $-\frac{1}{3}$ і $+\frac{2}{3}$.

Всі кварки мають спин $\frac{1}{2}$ і баріонний заряд $\frac{1}{3}$.

Кварки *u*, *c*, *t* називають *верхніми*, оскільки вони мають дробовий електричний заряд $+\frac{2}{3}$.

Кварки *d*, *s*, *b* мають електричний заряд $-\frac{1}{3}$ і їх називають *нижніми*.

Характеристики кварків наведено у таблиці 17 (спін $J = \frac{1}{2}$,

парність $P = +1$ ($J^P = \frac{1^+}{2}$).

Кварк s є носієм дивності, c - чарівності, b - краси.

Таблиця 17

Характеристика кварка	Тип кварка $J^P = \frac{1^+}{2}$					
	Верхній u	Нижній d	Дивний s	Чарівний c	Красивий b	Істинний t
Електричний заряд Q	$+\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$+\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$+\frac{2}{3}$
Баріонне число B	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
Спін J	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Парність P	+1	+1	+1	+1	+1	+1
Ізоспін T	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0
Проекція ізоспіну T_z	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	0
Дивність s	0	0	-1	0	0	0
Чарівність c	0	0	0	+1	0	0
Красивість b	0	0	0	0	-1	0
Справжність t	0	0	0	0	0	+1
Маса, MeV	≈ 5	≈ 7	≈ 150	≈ 1350	≈ 4700	≈ 22000
Маса в складі адрону, GeV	0,33	0,33	0,51	1,8	5	180
Маса «вільного» кварка, GeV	0,005	0,007	0,15	1,3	4,1-4,4	$178 \pm 4,3$

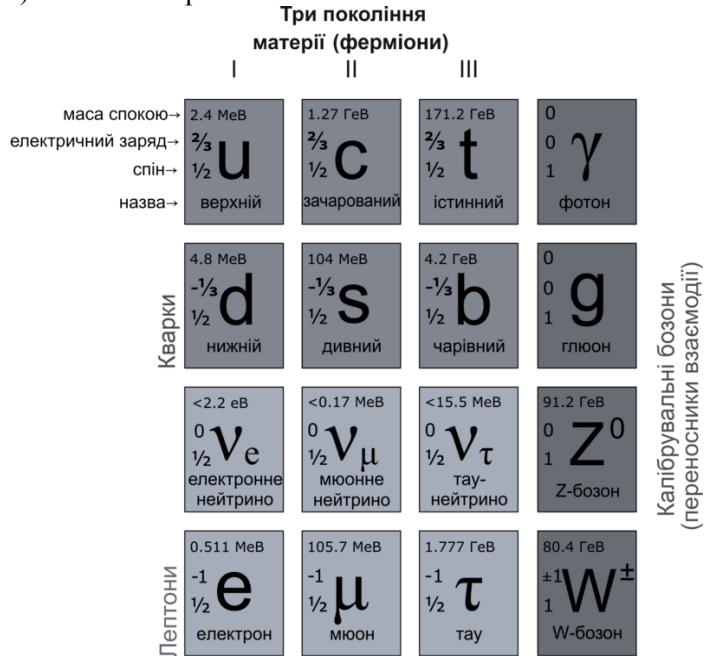
Кварки класифікують ще й за поколінням (див. табл. 18 та рис. 149).

Таблиця 18

Символ	Назва	
	Українська	Англійська
Перше покоління		
u	Верхній	up
d	Нижній	down

Друге покоління		
s	Дивний	strange
c	зачарований	charm (charmed)
Третє покоління		
b	Красивий	beauty (bottom)
t	Істинний	truth (top)

Також кварки мають особливу характеристику - кольоровий заряд. Для кожного кварка існує відповідний антикварк. Кожний із 6 запахів кварків (u, d, c, s, b, t) існує в трьох умовних кольорових різновидностях: жовтий, синій і червоний. Антикварки несуть відповідні кольорові антизаряди: антижовтий, антисиній, античервоний (або в прийнятій умовності фіолетовий, помаранчевий, зелений). Тобто всього налічується 18 кварків (6 кварків по 3 кольори) і 18 антикварків.



вільних кварків, тобто кварків, сильно віддалених від всіх інших кварків виявити не вдається. Наприклад, протон має кваркову структуру $p = (uud)$, тобто складається із двох u -кварків і одного d -кварка; нейтрон - $n = (udd)$, тобто складається із одного u -кварка і двох d -кварків.

Кварки існують тільки в зв'язаному стані, і явище, що приводить до нерозриву кваркових зв'язків, називається *конфайнмент*.

Хоч гіпотеза кварків була вдалою, оскільки вона давала можливість з єдиних позицій пояснити властивості більшості елементарних частинок, але, незважаючи на численні пошуки на прискорювачах високих енергій, кварків у вільному стані в космічному промінні і навколишньому середовищі не виявлено.

Тепер важко говорити про те збережена ця гіпотеза чи на зміну їй прийде інша. Важливо те, що покладено початок створенню єдиної теорії, яка об'єднує чотири фундаментальні взаємодії.

ПИТАННЯ ДЛЯ КОНТРОЛЮ ТА ПЕРЕВІРКИ ЗНАНЬ З ЯДЕРНОЇ ФІЗИКИ

1. Предмет ядерної фізики. Історичні етапи її розвитку.
2. Ядерна модель атома за Резерфордом.
3. Протонно-нейтронна модель ядра.
4. Ядерна фізика і фізика елементарних частинок.
5. Фундаментальна взаємодія між частинками: електромагнітна, гравітаційна, сильна і слабка взаємодії.
6. Опис стану руху елементарних частинок.
7. Закони збереження у перетворенні ядер та елементарних частинок.
8. Будова атомного ядра. Основні властивості та характеристики нуклонів.
9. Заряд атомного ядра. Досліди Мозлі.
10. Маса атомного ядра та способи її визначення.
11. Енергія зв'язку та дефект маси атомного ядра.
12. Ізобари, ізотопи, ізотони.
13. Розміри ядра і способи їх визначення.
14. Загальні закономірності радіоактивного розпаду ядер.
15. Рівняння стану вікової рівноваги.
16. α -радіоактивний розпад. Експериментальні особливості α -

розпаду.

17. Теорія α -радіоактивного розпаду. Визначення радіуса ядра на її основі.

18. β -радіоактивний розпад і його теорія.

19. γ -випромінювання ядер.

20. Тривалість життя збудженого ядра. Метастабільні стани збудженого ядра.

21. Ефект Мессбауера.

22. Основні характеристики ядерних сил.

23. Елементарна теорія дейтрона.

24. Нуклон. Нуклонні взаємодії та визначення радіуса дії ядерних сил.

25. Обмінний характер ядерних сил.

26. Краплинна модель ядра. Формула Вайцекера.

27. Труднощі краплинної моделі. Розповсюдженість ізотопів у метagalactic. Спін ядра. Магнітні та електричні моменти атомних ядер.

28. Оболонкова модель ядра.

29. Типи ядерних реакцій.

30. Символіка під час запису ядерних реакцій.

31. Класифікація ядерних реакцій за енергією, за родом реагуючих ядер і частинок, за характером ядерних перетворень.

32. Ефективний переріз σ ядерних реакцій. Функція збудження ядер $\sigma(E)$.

33. Характер протікання ядерної реакції за Бором.

34. Компаунд-ядро (складне) і його характеристики.

35. Гіпотеза Бора про незалежність розпаду компаунд-ядра від способу його одержання.

36. Резонансні явища у ядерних перетвореннях.

37. Ширина Γ енергетичного рівня і зв'язок її з дискретними ймовірностями розпаду збудженого ядра.

38. Повна ширина енергії збудження та повна ймовірність розпаду ядра.

39. Формула Брета-Вігнера для описання резонансних функцій збудження ядра.

40. Шляхи вивільнення ядерної енергії для потреб народного господарства: ядерний синтез; реакції поділу важких ядер.

41. Стійкість масивних ядер. Умова стійкості ядра.

42. Порогова енергія поділу - енергія активації ядра.

43. Збудження масивних ядер нейтронами і умова їх поділу.
44. Можливість викликання реакції поділу нейтронами в ядерних ізотопах.
45. Оцінка вивільнення енергії під час ділення ядра $^{235}_{92}\text{U}$.
46. Пояснення високої β -активності новостворених ядер-продуктів поділу ядра урану $^{235}_{92}\text{U}$.
47. Ланцюгова реакція в ядерних реакторах.
48. Коефіцієнт розмноження нейтронів у ядерному реакторі.
49. Реактори на швидких нейтронах (брідер).
50. Термоядерні реакції синтезу і умови їх протікання. Опис кількох конкретних термоядерних реакцій з відміткою про їх енергетичний вихід.
51. Вивільнення енергії у ядерних реакціях синтезу як фундаментальна проблема сучасної фізики.
52. Обґрунтування проблеми вивільнення енергії у ядерних реакціях синтезу з позиції сучасних проблем народного господарства.
53. Керовані термоядерні реакції в магнітних пастках.
54. Критерій фізичного порогу термоядерної реакції. Критерій Лоусона.
55. Загальна схема лазерного термоядерного і холодного синтезу атмосфери ^2_1H і ^3_1H .
56. Елементарні частинки та їх основні характеристики. Класифікація елементарних частинок.
57. Закони збереження у перетворенні елементарних частинок.
58. Початкові відомості про структуру нуклонів.
59. Поняття про систематику елементарних частинок.
60. Гіпотеза про кварки.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА З ЯДЕРНОЇ ФІЗИКИ

Ядерна фізика

1. Альперін М.М., Манакін Л.О. Теоретична фізика. Фізика ядра та елементарних частинок: Навчальний посібник. К.: Вища школа, 1979. 150 с.
2. Ахієзер О.І., Бережной Ю.А. Теорія ядерних реакцій: Навчальний посібник. Харків: Основа, 2001. 256 с.
3. Ахієзер О.І., Бережной Ю.А. Теорія ядра: Навчальний посібник. Київ: Вища школа, 1995. 255 с.

4. Ахієзер О.І., Рекало М.П. Фізика елементарних частинок. К.: Наукова думка, 1978. 223 с.

5. Булавін Л.А., Тартаковський В.К. Ядерна фізика: Підручник. 2-ге вид., перероб. і доп. К.: Знання, 2005. 439 с.

6. Каденко І.М., Плюйко В.А. Фізика атомного ядра та частинок: Підручник. 2-ге вид., переробл. і доповн. Електронна версія. К.: Київський ун-т ім. Тараса Шевченка, 2019, 467 с.

7. Пасічний А.П. Фізика елементарних частинок. К.: Вища школа, 1980. 104 с.

8. Ситенко О.Г., Тартаковський В.К. Теорія ядра: Навч. посібник для студ. фіз. спец. вищих закл. освіти. 2-ге вид. К.: Либідь, 2001. 607 с.

9. Ядерна фізика. (Конспект лекцій): Посібник для студентів вищих навчальних педагогічних закладів освіти / Укладачі: А.Ф. Недибалюк, В.І. Солоненко, А.М. Сільвейстр. Вінниця: ТОВ Фірма «Планер», 2008. 86 с.

Розділ 3.

ЕЛЕКТРОННА ТЕОРІЯ РЕЧОВИНИ



Лекція 40. ВСТУП ДО ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕОРІЇ РЕЧОВИНИ

§143. Предмет і завдання електронної теорії речовини.

§144. Історія розвитку вчення про електронну теорію речовини.

§145. Методи дослідження електронної теорії речовини.

[5. §4.1-§4.8]

§143. Предмет і завдання електронної теорії речовини

У даному розділі посібника викладено електронну теорію речовини як частину курсу теоретичної фізики, що читається відповідно до навчальної програми в педагогічних університетах. За навчальним планом, який передбачений для підготовки майбутніх учителів з фізики цей курс читається на завершальному етапі вивчення курсу теоретичної фізики, тобто після вивчення усіх його розділів. Тому усі знання, якими необхідно володіти під час засвоєння курсу «Електронна теорія речовини» здобувачі вже засвоїли у попередніх розділах курсу теоретичної фізики.

Під *електронною теорією* розглядають класичну теорію електромагнітних явищ, а також теорію електричних, магнітних і оптичних властивостей речовини, що ґрунтується на вивченні руху і взаємодій електрично заряджених частинок.

Метою вивчення курсу є: формування знань про фізичні властивості тіл, що обумовлені рухом і взаємодією електронів або іонів, застосування їх під час вирішення професійних і науково-дослідних завдань.

Завдання курсу «Електронна теорія речовини» полягає у вивченні основних фундаментальних принципів опису електронних властивостей твердих тіл, розуміння значення електронів у формуванні тих чи інших явищ, фізичних властивостей речовини, розвитку навичок самостійного аналізу наукової фізичної літератури та завдань науково-дослідного характеру.

Предметом курсу є всі факти фізики та хімії за допомогою, яких дається якісна інтерпретація багатьох явищ природи, зокрема, кількісні результати, які мало відрізняються від тих, що їх дає квантова теорія.

Електронна теорія виникла й розвивалась в кінці XIX і на початку XX століття головним чином завдяки працям голандського

фізика Г. Лоренца. В основу електронної теорії покладені уявлення про те, що будь-яка речовина складається з позитивно і негативно заряджених частинок, зв'язаних між собою електромагнітними силами.

Електронна теорія речовини розширила межі застосування макроскопічної електродинаміки до електромагнітних явищ у речовині. Ці межі насамперед визначаються тим, що часові і просторові масштаби векторів поля (періоди, довжини хвиль) мусять бути ще достатньо великими порівняно з відповідними мікрowellичинами (періодами атомних процесів, міжатомними віддалами тощо). За цих умов електричні і магнітні властивості речовини справді можна в багатьох випадках характеризувати трьома величинами: діелектричною (ϵ), магнітною (μ) і питомою електропровідністю (σ), незалежними від частоти і напруженості електромагнітного поля.

З кожним роком обґрунтування електронної теорії та уявлення про процеси в речовині і окремих мікрочастинок зазнали радикальних змін. Створено нові теорії такі, як квантова механіка та електродинаміка. Але класична електронна теорія для широкого загалу зберігає своє значення й тепер.

Електронна теорія відіграла важливу роль у розвитку різних галузей фізики і хімії. Вона була перехідним етапом у створенні сучасної атомної фізики. За останні десятиліття вона дістала широке технічне застосування. На її основі розвинулась електронна оптика, технічна електроніка тощо.

§144. Історія розвитку вчення про електронну теорію речовини

Історія розвитку вчення про електронну теорію речовини пов'язана з вивченням властивостей електронів, їх ролі в атомах і молекулах, а також взаємодії між електронами. Основні моменти цього розвитку можна поділити на кілька етапів:

1. *Початки квантової механіки (початок XX століття).* Важливим кроком у розвитку теорії електронів було створення квантової механіки. У 1920-1930 роках вчені, такі як В. Гейзенберг, Е. Шредінгер і П. Дірак, розробили новий математичний апарат для опису поведінки електронів на атомному рівні.

2. *Теорія електронного газу.* У 1930 роках вчені, такі як Л. Вуд і Т. Фермі розвинули теорію електронного газу. Це була спроба

описати властивості електронів у металах, де вони взаємодіють між собою.

3. *Теорія зон і полів*. В середині XX століття вчені, такі як Ф. Блох і Л. Ландау розвивали теорію зон і полів. Це дозволило краще розуміти властивості електронів у кристалах і напівпровідниках.

4. *Електронна теорія металів*. У 1950-1960 роках учені вивчали електронну структуру металів, зокрема, застосовуючи теорію зон і полів. Це було важливим для розвитку напівпровідникової індустрії та розуміння електронної провідності.

5. *Молекулярна орбітальна теорія*. Ще однією важливою гілкою розвитку є молекулярна орбітальна теорія, яку розробили Л. Полінг та Р. Маллікен. Ця теорія дає можливість краще розуміти поведінку електронів у молекулах.

6. *Квантова хімія і електронна структура молекул*. У другій половині XX століття розвивалася квантова хімія, що дозволило краще розуміти електронну структуру молекул і хімічні властивості речовини.

Електронна теорія речовини є ключовою частиною сучасної фізики та матеріалознавства і описує властивості електронів у різних матеріалах. Розглянемо деякі хронологічні моменти розвитку електронної теорії речовини. Вони відображають поступовий розвиток нашого розуміння електронної теорії речовини, що має велике значення для різних наукових галузей та технологічних застосувань.

Р.-Ж. Аюї, О. Браве, Є. Федоров, А.М. Шенфліс розвили вчення про внутрішню будову кристалів та їхні симетрії на основі атомістичних уявлень (кінець XVIII-XIX ст.). Однак в XIX ст. хімічна та фізична атомістика й атомістика в кристалографії не мали загальної теоретичної основи, нею стала в XX ст. квантова теорія будови атомів, молекул і кристалів, створена в результаті розвитку атомної фізики.

Явище виникнення різниці потенціалів у металевому бруску, кінці якого мали різну температуру, відкрив (випадково) у 1822 р. Томас Зеєбек. *Ефект Зеєбека* - це явище виникнення електрорушійної сили між двома контактами різних провідників, які перебувають за різної температури. Ефект Зеєбека виникає в колі, яке складається із двох спаяних між собою провідників (термопара).

Явище нагрівання або охолодження контакту між

провідниками, коли через нього проходить електричний струм, відкрив французький фізик Жан Пельтьє у 1834 р. *Ефект Пельтьє* - явище виділення або поглинання тепла на контактах двох провідників за проходження через них електричного струму. Якщо контакт нагрівається, то ефект Пельтьє називають *позитивним*, якщо охолоджується - *негативним*.

В 1853 р. емпірично був встановлений закон Відемана-Франца згідно з яким за однакової температури відношення $\frac{\chi}{\lambda}$ - однакове для всіх металів, тобто виходячи із цього закону можна записати:

$$\frac{\chi}{\lambda} \approx 3 \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T. \quad (144.1)$$

Крива намагнічення феромагнетитка була вперше докладно вивчена в 1871 р. О.Г. Столетовим.

В 1895 р. П. Кюрі встановив, що парамагнітна сприйнятливість газоподібного кисню обернено пропорційна абсолютній температурі

$$\chi_p = \frac{C}{T}, \quad (144.2)$$

де C - стала Кюрі.

Відповідно до класичної теорії причиною діамagnetизму є обертання електронів, що індукуються зовнішнім магнітним полем. Кутова швидкість цього обертання визначається теоремою Лармора, яка встановлена у 1897 р.:

$$\vec{\omega}_L = - \frac{e}{2mc} \vec{H}. \quad (144.3)$$

У 1900 р. М. Планк дає кількісний та якісний аналіз дискретності характеру випромінювання і поглинання світла речовиною.

А. Ейнштейн у 1905 р. створив квантову теорію світла (на прикладі явища зовнішнього фотоефекту). В 1917 р. А. Ейнштейн розробив принцип індукційного випромінювання, що лежить в основі теорії генерації і підсилення електромагнітних хвиль (ЕМХ).

Н. Бор (1911-1913 pp.) використав квантовий характер випромінювання і поглинання світла для пояснення спектральних закономірностей атомарного водню.

У 1928 р. Л.І. Мандельштам і Г.С. Ландсберг виявили розсіяння світла на молекулах речовини, що істотно розширило розуміння взаємодії світла з речовиною.

У 1934 р. П.О. Черенков відкрив, а І.Є. Тамм та І.М. Франк розробили теорію випромінювання світла електронами, які

переміщуються у прозорому середовищі з надсвітловою швидкістю.

П. Друде (1900 р.), Г. Лоренц (1905 р.) створили класичну електронну теорію провідності металів, у якій передбачалось, що в металі міститься газ вільних електронів, який підлягає класичній статистиці.

В 1905 р. М. Ланжевен запропонував класичну теорію парамагнітної сприйнятливості, яка дала можливість отримати закон Кюрі (144.2) і з'ясувати мікроструктуру сталої Кюрі C . У цьому ж році (1905 р.) отримана формула Ланжевена для діамагнітної сприйнятливості (з урахуванням поправок Паулі):

$$\chi_d = -\frac{NZe^2a^2}{6mc^2}. \quad (144.4)$$

Перше вдале квантове пояснення температурної залежності теплоємності твердих тіл було дано А. Ейнштейном (1906 р.). В моделі, розглянутій ним, всі атоми твердого тіла здійснюють теплові коливання з однаковою частотою ω_E .

В 1907 р. Ф.-Р. Вейсс використав уявлення про молекулярне поле для опису основних властивостей феромагнетиків.

Надпровідність була відкрита в 1911 р. Г. Камерлінг-Онсом під час вимірювання залежності електричного опору ртуті від температури.

П. Дебай (1912 р.) передбачив, що тверде тіло можна розглядати як неперервне середовище, в якому поширюються пружні хвилі. Тобто в наближенні Дебая для $T \rightarrow 0$ фононна теплоємність твердого тіла прямує до нуля за законом T^3 .

Ефект насичення намагніченості був виявлений Г. Камерлінг-Онсом і його співробітниками в 1923 р. Для $T = 1,31 \text{ K}$ і $H = 22000 \text{ e}$ (ерстед) намагніченість сульфату гадолінію досягла 84% від $M_{\max}$ (максимальна намагніченість системи).

У 1927 р. В. Паулі встановив, що незалежність парамагнітної сприйнятливості ряду металів від температури вказує на те, що в цих металах парамагнетизм зумовлений електронами провідності, які не підлягають класичній статистиці. Відповідно до принципу Паулі за $T = 0$ у відсутності магнітного поля електрони заповнюють не тільки нульовий рівень, але й усі рівні до енергії Фермі ξ .

Явище електронного парамагнітного резонансу (ЕПР), було теоретично передбачено в 1923 р. Я.Г. Дорфманом. Експериментально електронний парамагнітний резонанс був відкритий К.Є. Завойським в 1944 р.

У 1927 р. Я.Г. Дорфман експериментально показав, що високої напруженості магнітного поля в феромагнетиках немає.

Розв'язання питання про природу феромагнетизму було дано в 1928 р. Я.І. Френелем і пізніше В. Гейзенбергом.

Розв'язання проблеми діамagnetизму вільних електронів було дано Л.Д. Ландау. В 1930 р. він показав, що відповідно до квантової теорії магнітне поле змінює розподіл рівнів енергії. Ці рівні можна знайти розв'язавши рівняння Шредінгера.

Перше теоретичне пояснення існування доменів було дано в 1930 р. фізиками Я.І. Френкелем і В. Дорфманом. *Домен* - просторова область, всередині якої певна фізична характеристика однакова, проте відрізняється від такої ж характеристики в сусідній області. Домени розділені між собою доменними стінками.

Характерним прикладом домену є магнітний домен у феромагнетиках - область повного намагнічування, в якій всі магнітні моменти атомів орієнтовані однаково. Аналогічні області упорядкування виникають також у сегнетоелектриках, рідких кристалах тощо. У випадку ефекту Ганна напівпровідник може розбитися на області високої й низької провідності, які теж називають *доменами*.

В 1935 році термодинамічна теорія доменної структури феромагнетика, запропонована Л.Д. Ландау і Є.М. Ліфшицем підтвердила виведення, запропоновані Я.І. Френкелем і В. Дорфманом.

У 1948 р. Є.М. Ліфшиц показав, що для великого лінійного розміру феромагнетика (L), відбувається розгалуження доменів поблизу поверхні феромагнетика. Для малих L поділ феромагнетиків на домени виявляється практично не вигідним із-за переваги на малих відстанях обмінної взаємодії над магнітною. Разом з тим для достатньо малих значень L (за оцінками Є.І. Кондорського для $L \sim 10$ нм) феромагнетик є *однодоменим*.

У 1957 р. І.Є. Дзялошинський показав, що у деяких з'єднаннях завдяки певній симетрії кристала антиферомагнетизм реалізується за порушення магнітної колінеарності моментів. В цьому випадку виникає *слабкий феромагнетизм*.

В 1931 р. Я.І. Френкелем було введено поняття про екситони під час пояснення поглинання світла в кристалічних діелектриках. Екситон (від лат. *excito* - збуджую) - квазічастинка, електронне збудження в напівпровіднику або діелектрику, яке не переносить

електричного заряду або маси.

В 1937-1938 рр. було введено поняття *екситони Ваньє-Мотта* - це система, яка може рухатися у кристалі, разом з тим здійснюючи перенесення енергії без перенесення електричного заряду.

В 1952 р. Є.Ф. Гросом і його співробітниками вперше було дано експериментальне підтвердження існування водневоподібного спектру екситона поблизу краю власного поглинання.

Існування антиферомагнетизму було теоретично передбачено в 1932 р. Л. Неєлем і в 1933 р. Л.Д. Ландау. Експериментально антиферомагнетизм був відкритий в 1938 р. під час дослідження окису марганцю.

В 1949 р. Шулл і Сمارт після проведеного дослідження отримали результати першого нейтронографічного дослідження окису марганцю.

В 1959 р. під час дослідження MnAu_2 виявилось, що магнітні моменти Mn лежать в площинах кристалу і повертаються від однієї площини до сусідньої на кут 51° .

В 1933 р. В. Мейсснер і Р. Оксенфельд виявили, що в метал, який знаходиться в надпровідному стані, за достатньо малої напруженості зовнішнього магнітного поля магнітний потік не проникає.

До ефекту Мейсснера приводить рівняння, запропоноване в 1935 р. Ф. Лондоном і Г. Лондоном (друге рівняння Лондонів)

$$\text{rot} \vec{j}_s = - \frac{n_s e^2}{mc} \vec{B}, \quad (144.5)$$

де n_s - концентрація, $\vec{j}_s$ - густина струму надпровідних електронів.

Ф. Лондон в 1935 р. під час вивчення ефекту Мейсснера прийшов до висновку, що «жорсткість» хвильової функції вказує на існування в надпровідному стані деякого дальнього порядку, що корелює імпульси електронів провідності на великих відстанях.

Виходячи із представлення про макроскопічну протяжність хвильової функції напівпровідника, Ф. Лондон висловив у 1950 р. передбачення про квантування магнітного потоку у багатозв'язкових надпровідниках (наприклад, надпровідному кільці, в надпровіднику з отвором, в надпровідному порожньому циліндрі).

Передбачення Лондона було експериментально підтверджено в 1961 р. (Б. Дівер, У. Фербенк і незалежно Р. Долл і М Небауер).

В 1950 р. В.Л. Гінзбург і Л.Д. Ландау узагальнили теорію Лондонів з метою врахування n_s від координат. Це врахування

особливо важливе під час розгляду межі між нормальною і надпровідною областями, де n_s змінюється від нуля (в області нормального стану) до кінцевого значення (в області надпровідного стану). Із теорії Гінзбурга і Ландау випливає, що в залежності від знаку поверхневої енергії на межі між нормальною і надпровідною областями необхідно розрізняти надпровідники I і II роду.

Змішаний стан в області $H_{K_1} < H < H_{K_2}$ (де H_K - критичне значення напруженості магнітного поля, для якого зникає надпровідний стан) було експериментально виявлено Шубніковим у 1937 р. Відповідно до думки Абрикосова (1956 г.) в змішаному стані проникнення магнітного поля відбувається шляхом утворення ниток, центри яких знаходяться у нормальному стані.

Модель, що враховує існування як локалізованих, так і нелокалізованих електронів була запропонована в 1934 р. Шубніним і Воносовським. Коли атоми розташовані близько один до одного у твердому тілі, більшість електронів залишаються *локалізованими*, тобто можна вважати, що вони належать певному атому. *Нелокалізовані (делокалізовані) електрони* - це електрони, які не обмежуються зв'язками між двома атомами, але замість цього їм дозволено рухатися між трьома або більше.

В 1938 р. П.Л. Капіца відкрив в He II явище надтекучості. В 1941 р. Л.Д. Ландау показав, що властивість надтекучості слідує із постульованого ним спектру елементарних збуджень $\mathcal{E}(p)$. Закон дисперсії, був експериментально підтверджений шляхом вивчення розсіювання нейтронів у рідкому гелії (Ларсен, Хеншоу, Ярнейль та ін.).

Як відомо, електрони провідності надпровідника утворюють квантову рідину. Відповідно до гіпотези Л.Д. Ландау (1941 р.) енергетичні рівні квантової рідини відповідають стаціонарним станам рідини в цілому, а не станам окремих частинок.

Представлення про квазічастинки, як загальні методи випромінювання енергетичного спектру макроскопічного тіла, було введено Л.Д. Ландау в 1940-1941 роках під час створення теорії надтекучості. Виходячи з цього методу кожному слабозбудженому стану макроскопічного тіла однозначно співставляється стан ідеального газу невзаємодіючих елементарних збуджень.

Важливим висновком із дворідинної моделі було передбачення існування в He II «другого» звуку. На відміну від «першого» звуку, що являє собою коливання густини (за яких нормальна і надтекуча

компоненти рухаються як одне ціле), а у випадку (другого) звуку нормальна і надтекуча рухаються в протифазі. Відповідно теорії Ландау (1941 р.) «другий» звук являє собою хвилі густини в газі збуджень. У He II він був експериментально відкритий В. Пешковим у 1944 році.

М.М. Боголюбов в 1947 р. показав, що неідеальний газ бозонів з відштовхуванням володіє властивістю надтекучості. Умова надтекучості, як показав Б.Т. Гейлікман (1973 р.), може виконуватися також у випадку неідеального газу домішок водню.

Вперше ідея про існування квантових вихорів була висунута Онзагером у 1948 р. *Квантовий вихор* - топологічний дефект, який проявляється в надплинності та надпровідності. Зазвичай, квантування циркуляції швидкості в надплинних рідинах відрізняється від квантування в надпровідниках. Квантові вихори виникають, коли до надпровідника прикладається зовнішнє магнітне поле. Воно проникає в надпровідник у вигляді квантованих магнітних силових трубок, що утворюють вихори.

Теоретичне пояснення надпровідності зустріло великі проблеми. Важливе значення розуміння природи надпровідності мало відкриття Емануеля Максвелла, Чарльза Рейнольдса та ін. у 1950 р. ізотопічного ефекту. *Ізотопічний ефект* - фізичне явище в багатьох низькотемпературних надпровідниках, яке полягає в залежності критичної температури від маси ізотопу. Ефект було відкрито незалежно Е. Максвеллом та Ч. Рейнольдсом.

В 1945 р. відкритий ефект Л.Е. Гуревича, у якому говориться про те, що більш значні величини отримуються під час врахування захоплення електронів фононами.

В 1950 р. відповідно Г. Фреліху надпровідність зумовлена взаємодією електронів провідності, яка проявляється в результаті випромінювання і поглинання віртуальних фононів. Фонон, яким обмінюються електрони, називають *віртуальним фононом*.

У 1948 р. введено квантовий параметр де Бюра:

$$\left(\frac{a_0}{d}\right)^2 \sim \frac{\hbar}{d\sqrt{MU}} \sim \Lambda, \quad (144.6)$$

де Λ - квантовий параметр де Бюра.

Найбільше значення (0,49) Λ має для ^3He . Такого ж порядку величини Λ є для ^4He і ^2H . На порядок менша величина Λ у неону. В інших чистих речовин величина Λ значно менша.

Для опису електромагнітних властивостей надпровідників у

1953 р. Б. Піппардом була запропонований нелокальний зв'язок між густиною струму і векторним потенціалом. У цьому ж році Піппард на основі експериментальних результатів (ще до створення теорії БКШ) зробив висновок про недостатності локального рівняння Лондонів і необхідності врахування нелокального зв'язку між $\vec{j}$ (густина струму) і $\vec{A}$ (векторний потенціал).

Як показав Д. Бардін у 1956 р., що вирази, пов'язані з $Q(\vec{q})$ і $K(\vec{q})$ (векторний потенціал) наводять в наближенні вільних електронів провідності до результатів Ландау для діамантної сприйнятливості.

В 1956 р. Л. Купер показав, що якщо імпульси електронів розташовані поблизу поверхні Фермі, то за як завгодно слабого притягання між електронами утворюються зв'язані пари (ефект Купера).

Теорія Бардіна, Купера, Шріффера (БКШ) і М. Боголюбова (1957 р.) - мікроскопічна теорія надпровідників, що є на сьогоднішній день домінуючою. У її основі лежить концепція куперівської пари: корельованого стану електронів із протилежними спінами та імпульсами.

Ідея молекулярного підсилення світла була запропонована В.А. Фабрикантом і його співробітниками в 1951 р. В 1954 р. М.Г. Басов, і О.М. Прохоров розробили теорію квантового генератора радіохвиль і створили молекулярний генератор. В 1954 р. була опублікована також праця Ч. Таунса і його співробітників, в якій був описаний квантовий генератор на молекулах аміаку. В 1960 р. Т. Мейман здійснив стимулювання випромінювання світла на рубіні. Колектив учених під керівництвом Г. Петраша створив перші потужні підсилювачі світла для оптичних приладів, чим істотно розширили їхні можливості.

В 1950 р. К. Перселл і Р. Паунд довели експериментально можливість отримання індукційного (вимушеного) випромінювання. Експериментально цей метод був вперше реалізований в 1951 р. Перселлом і Паундом ядерними спінами.

Вебер, Гаунс у 1953-1954 рр. запропонували використовувати вимушене випромінювання для посилення у мікрохвильовому діапазоні.

В 1939 р. В.О. Фабрикант запропонував використовувати електричний розряд в газі для отримання від'ємного коефіцієнта поглинання світла. Перший газовий лазер був створений в 1961 р. в

двокомпонентній гелій-неоновій системі.

Т. Мейнман (США) у 1960 р. побудував перший діючий імпульсний оптичний генератор на рубіні.

В 1961 р. А. Джаван, В. Беннет створили газовий лазер, який працював у неперервному режимі на суміші $\text{He} + \text{Ne}$.

Інжекторний метод інверсії населеності був запропонований в 1961 р. радянськими фізиками М.Г. Басовим, О.І. Крохіним, Ю.М. Поповим. Перший інжекційний напівпровідниковий лазер на арсеніді галію був створений в 1962 р. Лазери на $p - n$ -переході мають високий ККД перетворення електричної енергії у випромінювання ($\sim 50\%$).

Перший рідинний лазер (в ньому використовується розчин хелата європія) був створений в 1963 р. В якості розчинника була застосована суміш етилового і метилового спиртів. Тоді було отримано лазерне випромінювання з довжиною хвилі $\lambda = 613,1 \text{ нм}$.

В 1970 р. отримано лазерне випромінювання в результаті опромінення швидкими електронами рідкого ксенона.

Значний вклад у розвиток теорії і розробки принципів будови термоелектричних приладів вніс академік А.Ф. Йоффе (1964 р.). Перші моделі термогенераторів виготовлялися із PbS і SbZn із невеликими домішками олова та вісмуту. Потужність перших термогенераторів, виготовлених вказаним вище способом, була порядку 1,6-3 Вт. У теперішній час існують термоелектрогенератори потужністю порядку 1 кВт.

Л.Д. Ландау в 1946 р. передбачив, що затухання плазмових хвиль можливо також без зіткнень частинок плазми в результаті кінетичного ефекту.

Електричні плазмові коливання з частотою

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}} \quad (144.7)$$

були виявлені І. Ленгмюром і Л. Тонксом (1929 р.) в газовому розряді. В 1948 р. було експериментально виявлено резонансну структуру втрат енергії електронів, що пройшли через тонку металеву фольгу (Рутеман, Ланг). В 1951-1953 рр. Бом і Пайнс показали, що ця структура зумовлена збудженням плазмових хвиль (плазмонів), аналогічних коливанням в газовому розряді, виявлених Тонксом і Ленгмюром.

Існування геліконів у металах було передбачено

Константіновим і Перелем, а також Егренем у 1960 р. Експериментально гелікони були виявлені в 1961 р. Бауерсом, Ленжендіном, Роузом. *Гелікон* - низькочастотна електромагнітна хвиля, яка виникає в некомпенсованій плазмі, що знаходиться в зовнішньому постійному магнітному полі.

В 1965 р. в калії також були виявлені хвилі, що поширюються перпендикулярно до $\vec{H}_0$. Частоти цих хвиль близькі до $n\omega_c$ (де $n = 1, 2, 3, \dots$). Тому ці хвилі називаються *циклотронними*.

У 1964 р. був побудований атомний реактор «Ромашка» потужністю 500 Вт, у якому безпосередньо перетворюється тепла енергія в електричну.

В результаті досліджень, проведених на «Токамаках», встановлено, що утриманню плазми сприяє збільшення її поперечного перерізу. У «Токамаку-10» (1975 р.) об'єм плазми складає 5 м^3 . Плануються установки типу «Токамак» з об'ємом близько 400 м^3 . *Токамак* - тороїдальна установка для магнітного утримання плазми. Пристрій призначено для здійснення реакції термоядерного синтезу в високотемпературній плазмі в квазістаціонарному режимі, в цьому випадку плазма утворюється в тороїдальній камері і її стабілізує магнітне поле. Енергія, що виділяється під час цієї реакції, повинна перевищити енергію, що витрачається для формування плазми і запуску реакції.

Сучасний стан вчення про електронну теорію речовини включає в себе комп'ютерне моделювання електронних структур, розробок нових матеріалів на основі розуміння електронних властивостей, а також застосування квантових теорій до різноманітних галузей, включаючи фізику твердого тіла, хімію та біологію.

§145. Методи дослідження електронної теорії речовини

Серед методів, якими користуються під час досліджень в електронній теорії виділимо наступні:

1. Методи дослідження кристалів:

- *метод сильного зв'язку*;

- *метод ефективної маси*.

В методі сильного зв'язку хвильова функція електрона в періодичному полі кристалу подається у вигляді суми:

$$\psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} \psi_n(\vec{r} - \vec{l}), \quad (145.1)$$

де N - число вузлів ґратки; $\psi_n(\vec{r} - \vec{l})$ - сильно локалізована хвильова функція електрона в n -м стані атома, центр якого знаходиться у вузлі кристалічної ґратки, що визначається вектором $\vec{l}$.

Метод ефективної маси - враховує вплив кристалічних ґраток шляхом зміни інерційних властивостей електрона.

2. Серед вивчення макроскопічних властивостей речовини розрізняють методи:

- квазічастинки;
- непружного розсіювання нейтронів.

3. Для визначення вигляду фермі-поверхні використовується різні методи, але найбільш точні дані отримуються за допомогою ефекту де Гааза-ван Альфена.

Цей ефект спостерігається в області низьких температур. Він полягає в осциляціях магнітної сприйнятливості за зміни величини $\frac{1}{H}$ (де H - напруженість магнітного поля). Період осциляцій сприйнятливості безпосередньо пов'язаний з екстремальним перерізом поверхні Фермі $S_e(\xi)$:

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{|e|\hbar}{cS_e(\xi)}. \quad (145.2)$$

Осциляції, те саме, що коливання. Вони відкриті у Фізико-технічному інституті АН УРСР.

4. Під час дослідження атиферромагнетизму використовують *метод магнітної нейтронографії*.

Цей метод ґрунтується на залежності інтенсивності магнітних бреггівських відбивань від модулів магнітних моментів атомів (або іонів) і від їх орієнтації відносно площин і осей кристалічної ґратки.

5. У вимірюванні в'язкості речовини користуються *методом спостереження затухання крутильних коливань маятника, що поміщається в рідину*.

Цим методом було виявлено, що в'язкість He II мало відрізняється від в'язкості гелію He I . В гелію He II спостерігається механокалоричний ефект. *Механокалоричний ефект* - явище охолодження надтекучого рідкого гелію, що витікає із посудини через вузький капіляр під дією різниці тисків.

6. Методи електронного парамагнітного резонансу (ЕПР)

розрізняють такі:

- *метод імпульсної інверсії на 180° ;*
- *метод адіабатично швидкого проходження через резонанс;*
- *метод раптового обертання напруженості магнітного поля.*

Розглянемо, наприклад, метод раптового обертання напряму напруженості магнітного поля. Під час використання цього методу тверде тіло поміщається спочатку в сильне постійне магнітне поле з напруженістю $H \sim 10^3$ е. Після того як тіло намагнічується, величина H швидко зменшується до кількох ерстед, а потім за час порядку 10^{-7} с напрям H змінюється на протилежний та швидко збільшується до початкового значення. Якщо час релаксації, протягом якого тепловий рух встигає відновити рівноважний стан, що перевищує час обігу напряму напруженості магнітного поля, то система спінів виявляється в нерівноважному стані з від'ємною температурою.

Експериментально цей метод було вперше здійснено 1951 р. Перселом та Паундом ядерними спінами. Помістивши монокристал LiF в магнітному полі з напруженістю $H = 6376$ е, вони зменшили напруженість до 100 е і потім за час $2 \cdot 10^{-7}$ с змінили напрямок вектора H на протилежний. Після цього напруженість H була знову збільшена до 6376 е. Цей процес зайняв кілька секунд, що значно менший часу релаксації, який за кімнатної температури виявився для ядер близько 300 с. Таким шляхом вдалося отримати від'ємну температуру та спостерігати стимульоване випромінювання.

7. Для інверсії заселення в газовому лазері, яка необхідна під час збудження генерації в оптичному діапазоні розрізняють методи:

- *оптичного накачування;*
- *зіткнень першого і другого роду;*
- *дисоціації молекул;*
- *рекомбінації;*
- *хімічних реакцій;*
- *інжекційний метод інверсії заселення (напівпровідниковий лазер).*

8. Серед методів дослідження плазми можна виділити наступні:

- *метод магнітної ізоляції плазми;*
- *метод поздовжнього магнітного поля;*
- *метод металічної оболонки розрядної камери.*

9. Розробляються методи отримання керованої термоядерної реакції за допомогою:

- *лазерів;*

- гібридних реакторів;
- двокомпонентної плазми тощо.

Роботи, що проводяться у зв'язку з проблемою керування термоядерною реакцією синтезу, сприяють розвитку фізики плазми.

Лекція 41. ТВЕРДІ ТІЛА ТА ЇХ ВЛАСТИВОСТІ

§146. Типи зв'язків атомів в твердих тілах: іонний, ковалентний, металічний, молекулярний (Ван дер Ваальсівський), водневий та їх особливості.

§147. Геометрія кристалічної ґратки.

[2. §1, §2; 3. §3.1-§3.3, §3.5, §4.2; 5. §1.1-§1.5]

§146. Типи зв'язків атомів в твердих тілах: іонний, ковалентний, металічний, молекулярний (Ван дер Ваальсівський), водневий та їх особливості

Речовина може існувати в одному із 6-ти станів. З них три класичних - твердий, рідкий і газоподібний, які утворюються як правило з електронейтральних частинок. Ще три стани це - плазменний, конденсат Бозе-Ейнштейна (відкритий у 1995 році) і ферміонний конденсат (відкритий у 2003 році). В твердому стані речовина може бути кристалічною або аморфною.

Кристалічні тіла мають впорядковані розташування іонів, атомів або молекул з яких складається кристал. В аморфному стані - відсутній дальний порядок в розташуванні частинок, але можливий ближній порядок, який визначається характером зв'язків сусідніх атомів.

Розглянемо, які сили втримують сукупно всі атоми кристалу. Зв'язок між атомами кристалу майже повністю забезпечується силами електростатичного притягання між від'ємними зарядженими електронами та позитивно зарядженими ядрами. Роль сил магнітного походження незначна, а силами гравітаційної природи можна знехтувати.

Якщо задати просторовий розподіл ядер та розподіл їх швидкостей, тобто задати мікростан кристалу, то методами квантової механіки та статистичної фізики можна розрахувати енергію зв'язку в кристалі.

Проаналізуємо цю задачу більш детально. Існування стабільних зв'язків між атомами в кристалі говорить про те, що повна енергія кристалу, тобто сума кінетичних і потенціальних енергій всіх частинок, менша повної енергії такої ж кількості цих же частинок, якщо вони віддалені один від одного на нескінченність. Різниця цих двох енергій називається *енергією хімічного зв'язку*. Інакше кажучи, щоб розірвати кристал на окремі частинки і розвести їх в нескінченність необхідно затратити енергію, що дорівнює енергії зв'язку. За типом зв'язків кристали поділяють на: *іонні, ковалентні, металічні, молекулярні* (Ван дер Ваальсівські) і кристали з *водневими зв'язками*.

Іонні кристали - складаються з позитивно та негативно заряджених іонів, які утворюються внаслідок переходу електронів від атомів одного елементу до атомів другого елементу. Такі іони утворюються, наприклад, під час взаємодії лужних елементів з галогенами. Ці іони утворюють кристалічну ґратку за рахунок кулонівських сил взаємодій. Отже, *іонний зв'язок*, це зв'язок, що зумовлений електростатичною взаємодією протилежно заряджених іонів. На рисунку 150 наведений іонний зв'язок (розподіл заряду).

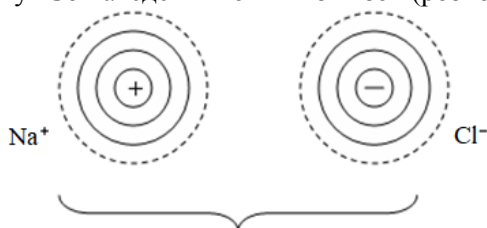


Рис. 150

Зауваження: в іонному кристалі валентні електрони локалізовані біля іонів практично повністю і розподіл заряду має майже сферичну симетрію. Для іонних кристалів характерні сильні поглинання в інфрачервоній області. Незначна електропровідність за низьких температур та хороша іонна провідність за високих температур.

Ковалентні зв'язки (кристали). Кристали з такими зв'язками називають ще *кристалами з гомеоплярними зв'язками*. В ковалентних кристалах зв'язки утворюються двома електронами з протилежними спінами по одному від кожного з атомів, що взаємодіють. Тоді така пара електронів одночасно належить двом

атомам, що утворюють ковалентний зв'язок. У цьому випадку густина валентних електронів може бути значною і в області між іонами на відміну від іонних кристалів. Ковалентний зв'язок (розподіл заряду) представлений на рисунку 151.

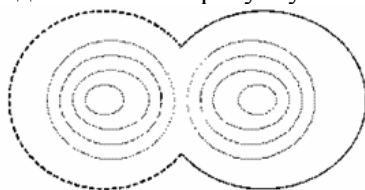


Рис. 151

Для ковалентних зв'язків характерна просторова направленість. Так наприклад, атом вуглецю, який має чотири валентних електрони в $2s$ стані і $2p$ стані, які утворюють чотири ковалентні зв'язки з сусідніми атомами, що розташовані у вершинах тетраедра (вуглецевий зв'язок).

Прикладом ковалентного кристалу є вуглець (C), в різних упаковках германій (Ge), кремній (Si). Понад 90% електронних приладів виготовляють з кремнію кристалічного та аморфного. Якщо ковалентний та іонний зв'язки розглядати, як два граничні випадки, то очевидно, що між ними повинні лежати кристали з проміжним типом зв'язку (іонно-ковалентним).

Металічні кристали характеризуються високою електропровідністю, тому зрозуміло, що значна частина електронів в металах повинна бути вільною, щоб мали можливість вільно рухатись. Частина електронів, що приймають участь в електропровідності називаються *електронами провідності*. На рисунку 152 приставлений кристалічний зв'язок.

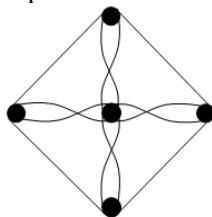


Рис. 152

В металах кристалічний зв'язок утворюється за рахунок

взаємодії періодичних електронів і колективізованих електронів провідності. Так наприклад, кристали лужних металів можна уявити собі у вигляді ґратки з правильно розташованими іонами, що занурена в більш менш негативну заряджену електронну рідину.

Зауважимо, що в металі число валентних електронів в атомі недостатнє для утворення двох електронних ковалентних зв'язків з усіма сусідами. Наприклад, в кристалі літію кожний атом має вісім сусідів. Для утворення двох електронних зв'язків необхідно було б мати не один, а вісім валентних електронів. Таким чином, в металічному кристалі на відміну від іонних та ковалентних порівняно невелике число електронів зв'язує велике число позитивних іонів.

Молекулярні кристали (Ван дер Ваальсівські). Прикладами молекулярних кристалів є кристали інертних газів (аргону, криптону). Такі кристали є прозорими діелектриками з низьким значенням енергії зв'язку та температури плавлення. Для криптону $T \approx 100$ К. Ці кристали складаються з атомів, що мають високе значення енергії іонізації. В атомах таких кристалів найбільш віддалені від ядра електронні оболонки повністю заповнені. Зв'язок між молекулами в молекулярному кристалі утворюється за рахунок сил міжмолекулярного притягання Ван дер Ваальса. З'ясуємо природу сил Ван дер Ваальса.

Розглянемо два атоми інертного газу, що розташовані на віддалі $R \gg r$ один від одного. Взаємодія між двома такими нейтральними атомами здійснюється так: електрони в атомах постійно рухаються навколо ядер навіть в найнижчому енергетичному стані. В результаті цього руху миттєве положення електронної хмари може не співпадати з ядром атома і тоді в атома виникає відмінний від нуля дипольний момент P . Цей дипольний момент створює в центрі сусіднього атома, що розташований на віддалі R , електричне поле напруженістю

$$E = \frac{2P_1}{R^3}, \quad (146.1)$$

яке в свою чергу наводить дипольний момент

$$P_2 = \alpha E = \frac{2\alpha P_1}{R^3}, \quad (146.2)$$

де α - у другого атома - це константа електронної поляризованості.

З електростатики відомо, що енергія взаємодії двох дипольних моментів P_1 і P_2 , які розташовані на віддалі $\vec{R}$ один від одного

$$u(R) = \frac{\vec{P}_1 \vec{P}_2}{R^3} - \frac{3(\vec{P}_1 \vec{R})(\vec{P}_2 \vec{R})}{R^5}. \quad (146.3)$$

Так як диполі P_1 і P_2 практично паралельні і майже колінеарні з R , то $\cos(\vec{P}, \vec{R}) = 1$ тоді можна записати вираз для потенціальної енергії взаємодії в такому вигляді:

$$\begin{aligned} u(R) &\approx \frac{P_1 P_2}{R^3} - \frac{3P_1 R P_2 R}{R^5} = \frac{P_1 P_2}{R^3} - \frac{3P_1 P_2}{R^3} = \\ &= -\frac{2P_1 P_2}{R^3} = -\frac{4\alpha P_1^2}{R^6}. \end{aligned} \quad (146.4)$$

Із співвідношення (146.4) видно, що два атоми з дипольними моментами P_1 і P_2 притягаються між собою.

Отже, потенціальну енергію виразу (146.4) зручно записати у вигляді:

$$u(-R) = -\frac{\text{const}}{R^6}. \quad (146.5)$$

Вираз (146.5) визначає енергію Ван дер Ваальса для взаємодій. Таку взаємодію називають ще *міжмолекулярною, диполь-дипольною взаємодією*. Сили притягання, що відповідають такій взаємодії отримали назву *Ван дер Ваальса*. Така взаємодія забезпечує зв'язок не тільки в атомах інертних газів, а і в багатьох кристалах органічних сполук.

Зауважимо, що величину енергії Ван дер Ваальса для взаємодії зручно оцінювати, якщо її виразити через ефективну температуру, що визначається із співвідношення:

$$u = kT_{\text{еф}}, \quad (146.6)$$

де k - стала Больцмана.

Фізичний зміст ефективної температури ($T_{\text{еф}}$) в тому, що вона приблизно вказує ту температуру за якої розриваються кристалічні зв'язки. Ефективна температура ($T_{\text{еф}}$) - близька до температури плавлення. Наприклад, кристал криптонію $T_{\text{еф}} = 100$ К, що дуже близько до температури плавлення.

Зауваження: потенціальна енергія Ван дер Ваальса пропорційна R^{-6} , то вона швидко спадає із зростанням віддалі (потенціальна енергія взаємодії). Ван дер Ваальсівський зв'язок набагато слабший за іонний та ковалентний зв'язки.

Кристали з водневими зв'язками. Так як нейтральний атом водню має один електрон, то він може приймати участь в одному

ковалентному зв'язку. Водневий тип зв'язку зумовлений тим, що електрони атома водню утворюють зв'язок з одним атомом, а протон, що залишився поляризує другий атом і притягує його. В результаті атом водню виявляється зв'язаний з двома атомами. Такий тип зв'язку і називається *водневим типом зв'язку*. Водневий зв'язок є найважливішою формою взаємодії між молекулами води (H_2O) і відіграє важливу роль в системах з F, O, N, Cl, C і S. Водневий зв'язок проявляється в органічних сполуках - у білках. Він сильніший Ван дер Ваальсівського, але слабший за іонний та ковалентний.

§147. Геометрія кристалічної ґратки

Просторова ґратка. Структура кристалічної ґратки описується виразом:

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (147.1)$$

де n_1, n_2, n_3 - довільні цілі числа; $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ - вектори основних просторових періодів.

Вираз (147.1) задає нам положення вузлів кристалічної просторової ґратки кристалу. Багатогранник, що утворений векторами $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ називається *елементарною коміркою*.

Весь кристал може бути побудований шляхом повторення елементарної комірки. Вибір векторів $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, а отже, і елемент комірки не являється однозначним. Наприклад, це видно з рисунка 153, на якому показано декілька способів вибору базисних векторів для однієї і тієї ж двовірної ґратки.

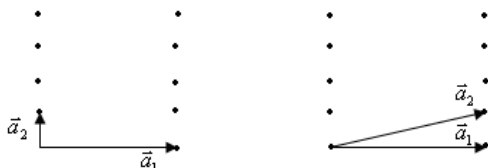


Рис. 153

Приклад. Розглянемо розміщення атомів в кристалі. Елементарну комірку можна побудувати і так, щоб вона була центрально-симетричною, користуючись спеціальним методом побудови. Така комірка називається *Вігнера-Зейтца*.

В елементарній комірці можуть знаходитись один або кілька атомів. Якщо в комірці знаходиться один атом, то можна сумістити вузол ґратки з цим атомом і таку ґратку називають *простою ґраткою*. Якщо в комірці знаходиться кілька атомів, то можна представити у

вигляді кількох комірок вставлених одна в одну.

Перетворення симетрії. Якщо кристалічна ґратка за певних переміщень співпадає сама з собою, то кажуть, що вона характеризується певними елементами симетрії. Отже, симетрія тіла або кристалічної ґратки визначаються сукупністю тих переміщень, які суміщають тіло саме з собою, а про самі переміщення говорять як про перетворення симетрії, або як про елементи симетрії. Кожне з можливих перетворень симетрії можна представити у вигляді комбінацій одного або кількох типів симетрії. До основних типів елементарної симетрії належать такі:

1. Поворот тіла на деякий кут навколо певної осі.
2. Дзеркальне відбиття в певній площині.
3. Паралельне перенесення на певну віддаль.

Охарактеризуємо коротко ці перетворення.

1. Якщо тіло суміщається саме з собою під час повороту навколо деякої осі на кут φ_n , причому

$$\varphi_n = \frac{2\pi}{n}, \quad (147.2)$$

то кажуть, що тіло має вісь симетрії n -го порядку.

Прикладами такого типу можуть бути фігури наведені на рисунку 154.

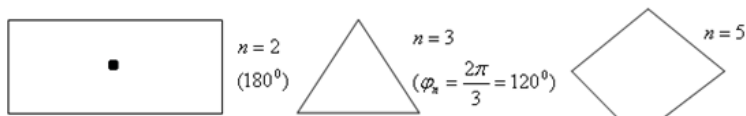


Рис. 154

2. Якщо тіло співпадає саме з собою під час дзеркального відбиття в деякій площині, то така площина називається *площиною симетрії даного тіла*. Комбінація цих двох типів симетрії дає інше перетворення симетрії. Наприклад, дзеркально-поворотну вісь n -го порядку. В цьому випадку тіло суміщається саме з собою на кут $\varphi_n = \frac{2\pi}{n}$ і в наступному дзеркальному відбиванні у площині, що перпендикулярна до осі (рис. 155).

Сукупність всіх перетворень симетрії даного тіла називається *групою перетворень симетрії*. Кожне з перетворень, що входить в групу називається *елементом симетрії*. Групи

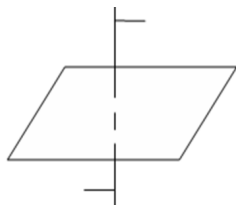


Рис. 155

перетворення симетрії вивчає теорія груп. Групи перетворення симетрії, які залишають нерухомими хоч одну точку групи тіла називаються *точковими групами*.

Виявляється, якщо обмежитись групами із скінченим числом елементів, то точкових груп симетрії буде всього 14.

Охарактеризуємо тепер третій тип симетрії.

3. Паралельне перенесення на деяку віддаль. В будь-якому кристалі можна вибрати три основних періоди $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ так, що довільний вузол ґратки, або всякий інший період ґратки можна представити у вигляді.

$$\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3. \quad (147.3)$$

В кристалічній ґратці основний період можна вибрати багатьма способами. Причому так звані нові періоди кристалічної ґратки будуть виражатись через ті, що вибрані раніше у лінійній комбінації з постійними коефіцієнтами. Цей тип симетрії паралельного перенесення називається ще й *трансляційною симетрією*. Наявність трансляційних елементів симетрії приводить до того, що в кристалі можуть бути і нові елементи симетрії, які являються комбінацією паралельного перенесення з осями і площинами симетрії. Це так звана гвинтова вісь n -го порядку і площина дзеркального зсуву.

Легко довести, що в кристалічній ґратці можуть бути осі симетрії тільки 1, 2, 3, 4 і 6-го порядку. Це пов'язано з тим, що площину можна заповнити трикутними прямокутниками, шестикутниками і ніколи не заповнити площину п'ятикутниками.

Домовимось надалі вибирати елементарну комірку так, що вона мала всі елементи симетрії кристалічної ґратки. На рисунку 156 наведено приклад. Вибір елементів симетрії кристалічної ґратки, який відображений на рисунку 156, *б* не підходить.

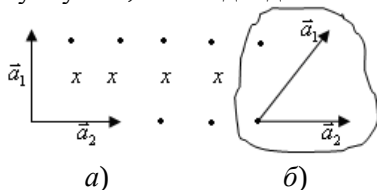


Рис. 156

Якщо користуватись цим правилом, то очевидно, що елементарна комірка в просторі може бути або тільки паралелепіпедом, або шестигранною призмою. Всяку складну

елементарну комірку можна представити як дві або кілька простих вкладених одна в одну.

Кристалічні системи (синголії). Розглянемо довільний паралелепіпед, що побудований на трьох довільних некопланарних векторах (три вектори не лежать в одній площині). Такий паралелепіпед повністю задається значеннями векторів $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ і кутом між ними. Будемо чисто формально вектори $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ називати *трансляційними періодами*. Тоді під час трансляційного перенесення одержаного паралелепіпеда на довільний вектор $\vec{A}$

$$\vec{A} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (147.4)$$

одержимо деяку періодичну структуру, яку утворюють вершини цього паралелепіпеда. Така періодична структура називається *граткою Браве*. Отже, паралелепіпед, що утворений граткою Браве повністю задається $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ і α, β, γ . В залежності від цих величин ми будемо отримувати різні ґратки Браве, які будуть характеризуватися різними елементами симетрії. Виявляється, що існує 14 ґраток Браве. Тобто існує 14 паралелепіпедів, складаючи, які можна отримати довільні періодичні структури. Отже, 14 ґраток Браве діляться на 7 кристалічних систем або синголій. Охарактеризуємо кожну з них.

1. Триклінна система (рис. 157) - вузли елементарних комірок розташовані у вершинах паралелепіпеда з ребрами

$$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma.$$

2. Моноклінічна система:

$$a \neq b \neq c, \alpha \neq \gamma \neq 90^\circ; \beta = 90^\circ.$$

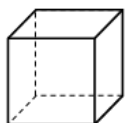


Рис. 157

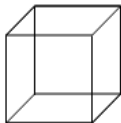


Рис. 158

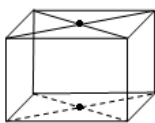


Рис. 159

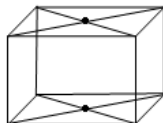


Рис. 160

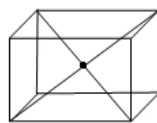


Рис. 161

Елементарна комірка реалізується у двох випадках:

1) примітивна (рис. 158) - вузлами, якої є тільки вершини паралелепіпеда;

2) базоцентрована елементарна комірка (рис. 159) - вузли, якої знаходяться не тільки у вершинах, але і в центрах основ.

3. Ромбічна або ортогональна система:

$$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Елементарні комірки реалізуються у трьох видах:

- 1) базоцентрирована (рис. 160);
- 2) об'ємноцентрирована (рис. 161);
- 3) гранецентрована (рис. 162).

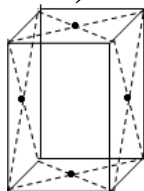


Рис. 162

4. Тетрагональна система:

$$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ.$$

5. Ромбоєдрична система:

$$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ.$$

6. Гексагональна система:

$$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ.$$

7. Кубічна система:

$$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ.$$

Кристалографічні індекси (індекси Міллера). Положення кристалічної величини визначається з допомогою трійки чисел (hkl) - індексів Міллера, які знаходяться так:

1. Проводять осі XYZ , що паралельні ребрам кристалічної комірки.

2. Знаходять три точки, в яких дана площина перетинає осі XYZ і виражають їх координати в одиницях періодів a_1, a_2, a_3 . Нехай у цьому випадку отримаємо значення m, n, p .

3. Беремо числа $\frac{1}{m}, \frac{1}{n}, \frac{1}{p}$ і приведемо їх до спільного знаменника. Тоді чисельники записуються в круглих дужках вони дають індекси Міллера.

Приклад. Нехай площина відсікає на осях XYZ відрізки:

$$\begin{array}{ccc} 4a_1 & 3a_2 & 3a_3 \\ m & n & p \end{array},$$

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{4}; \quad \frac{1}{n} = \frac{1}{3}; \quad \frac{1}{p} = \frac{1}{3};$$

$$\frac{3}{12} \quad \frac{4}{12} \quad \frac{4}{12}.$$

Отже, індекси Міллера для цієї площини $(3; 4; 4)$. Якщо

площина паралельна одній з осей, то відповідний індекс Міллера дорівнює нулю. Якщо площина перетинає вісь у від'ємному значенні координат, то на відповідний індекс Міллера ставлять зверху знак (-). Зобразимо основні площини в кристалі.

Сукупність площин даного кристалічного типу позначається індексом Міллера в фігурних дужках. Наприклад, всі дані кубічного кристалу $\{100\}$. На рисунку 163 показано площини кубічного кристалу з індексами (100), (110) і (111). Напрями в кристалі позначаються трійкою найменших цілих чисел $[u, v, w]$, що пропорційні компонентам вектора ґратки в одиницях періодів a_1, a_2, a_3 , який паралельний до даного напрямку.

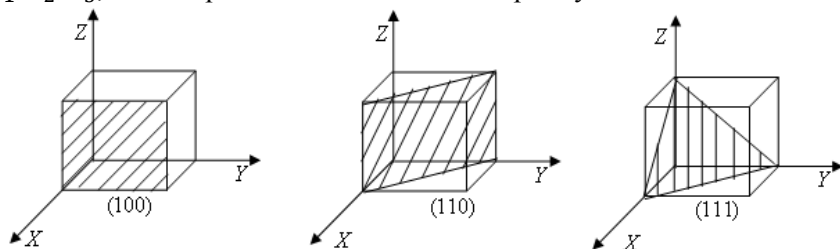


Рис. 163

Приклад. Якщо вектор ґратки в даному напрямку має компоненти $2a_1; \frac{1}{3}a_2; \frac{1}{2}a_3$, то цей напрямок позначається такими індексами $[12; 2; 3]$.

Позначимо ці напрямки в кристалі. На рисунку 164 показані індекси деяких напрямків в кубічному кристалі. Всі напрямки даного кристалічного типу позначаються індексами $[u, v, w]$.

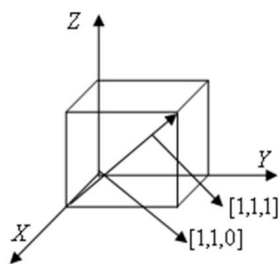


Рис. 164

Приклади кристалічної структури. Просту кубічну ґратку як правило мають іонні кристали, наприклад, NaCl, KCl та інші. Дуже поширена кубічна структура з об'ємноцентрованою ґраткою. Таку структуру називають структурою типу цинкової обманки ZnS. Вказані структури дуже часто зустрічаються в природі і легко піддаються розрахунку.

Лекція 42. ЗОННА ТЕОРІЯ ТВЕРДИХ ТІЛ

§148. Зонна структура енергетичного спектру носіїв заряду кристалів.

§149. Рівняння Шредінгера для кристалу.

§150. Обернена ґратка. Зони Бріллюена.

[2. §3-§5; 4. §5-§7, §15-§23; 5. §2.1-§2.4, §3.1-§3.8, §4.1-§4.6]

§146. Зонна структура енергетичного спектру носіїв заряду кристалів

Розглянемо N ізольованих атомів (N - порядку числа Авогадро), з'єднуючи які, ми спробуємо утворити кристал. Проаналізуємо як буде змінюватись у цьому випадку енергетичний спектр електронів в атомі.

Коли N атомів ізольовані і розташовані на достатньо великій віддалі один від одного. В довільному атомі на кожному енергетичному рівні може поміститись електронів не більше ніж кратність виродження цього рівня (за принципом Паулі). Тому під час утворення кристалу, кожний з енергетичних рівнів розщепиться на таке число підрівнів, щоб забезпечити виконання принципу Паулі. На рисунку 165 показано енергетичні спектри електронів в окремих атомах (ліворуч) та в кристалі (праворуч).

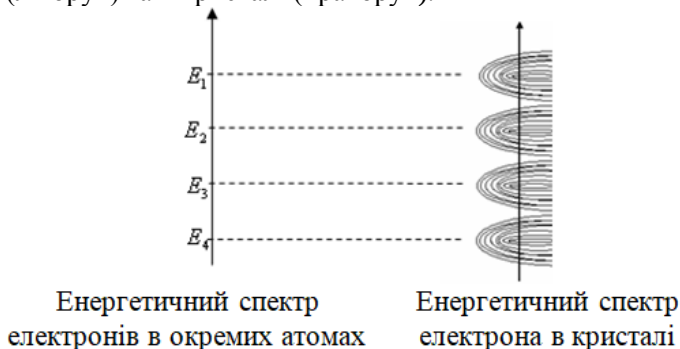


Рис. 165

Інакше кажучи, кожний енергетичний рівень електрона в атомі під час утворення кристалу розщеплюється в зони. Між зонами дозволених значень енергії (на рис. 166 пусті місця). Остання повністю заповнена електронами зона називається *валентною зоною*.

Зона дозволених значень енергії, що розташована вище забороненої зони називається *зоною провідності*. Зона провідності і валентна можуть розділятися забороненою зоною, а можуть і ні.

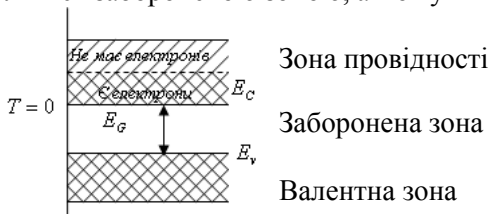


Рис. 166

В принципі, майже всі властивості металів, напівпровідників і діелектриків можуть бути пояснені виходячи з уявлення про ці три зони: валентну, заборонену і зону провідності. А отже, в залежності від розташування вказаних зон та величини забороненої зони між ними всі речовини можна поділити на три великі класи: *метали*, *напівпровідники* і *діелектрики*.

1. Метали. Якщо зона провідності частково заповнена електронами, то така речовина буде металом. Під час прикладання незначної різниці потенціалів електрони зони провідності можуть прискорюватись електричним полем, тоді вони будуть переходити на вищі рівні зони провідності (рис. 167). Отже, матеріал із вказаною зонною структурою буде хорошим провідником.

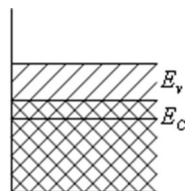


Рис. 167

Металами будуть також матеріали, в яких зона провідності для $T = 0$ зовсім незаповнена електронами, але вона перетинається з валентною зоною. У вказаній структурі електрони теж можуть прискорюватись електричним полем, переходячи на вищі енергетичні рівні зони провідності.

Тобто структура з таким розташуванням зон теж буде хорошим провідником. Зона дозволених значень енергії утворюється з кожного енергетичного рівня незалежно від того є на цьому рівні електрон чи немає. В даному випадку під час утворення кристалу з ізольованих атомів зона провідності виникає з того енергетичного рівня, на якому в атомі не було електрона. Але через перетин зони провідності з валентною зоною даний матеріал буде мати властивості металу.

2. Діелектрики - ними називаються такі речовини в яких для $T = 0$ зона провідності зовсім незаповнена електронами і відділяється

від валентної зони забороненою, шириною $E_c \geq 5$ еВ. Під час прикладання різниці потенціалів для такого зразка жоден з електронів не буде мати змогу прискорюватись електричним полем (рис. 168).

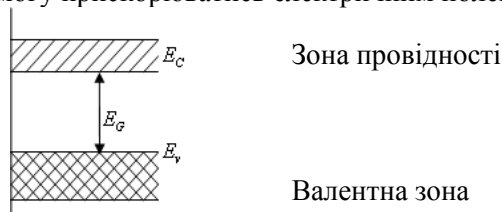


Рис. 168

Для електрона відсутні вільні незайняті енергетичні рівні, на які він міг би перейти отримавши енергію електричного поля.

3. Напівпровідники - це матеріали в яких для $T = 0$ зона провідності незаповнена електронами як і у діелектриків, але ширина забороненої зони $E_G \leq 5$ еВ (рис. 169).

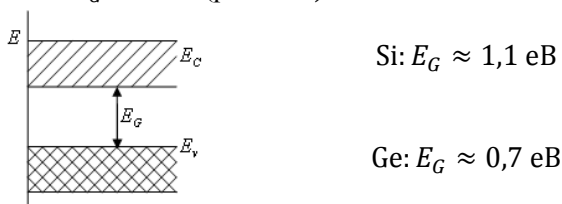


Рис. 169

Іноколи розподіл речовини на діелектрики і напівпровідники ведуть не з 5 еВ, а в інтервалі від 2 ÷ 5 еВ. Це залежить від температури. Для типових напівпровідників Si і Ge за $T \neq 0$ та звичайних температур можуть бути електрони в зоні провідності, які закидаються туди внаслідок хаотичного теплового руху. І тому в таких структурах буде слабка провідність, тому їх називають *напівпровідниками*. В типових напівпровідників зі збільшенням температури провідність зростає, хоча і можуть бути різні випадки. Зростання провідності пов'язано з перекиданням електронів з валентної зони в зону провідності та з появою дірок в валентній зоні.

§149. Рівняння Шредінгера для кристалу

Розглянемо кількісний розв'язок задачі про енергетичний спектр в кристалі. Аналогічна задача для окремого атома, як відомо розв'язувалась з рівняння Шредінгера

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0(r)]\psi(r) = E\psi(r), \quad (149.1)$$

де U_0 - потенціальна енергія електрона в атомі; ∇^2 - оператор Лапласа; r - радіус-вектор електрона; $\psi(r)$ - хвильова функція електрона; E - повна енергія електрона.

В квантовій механіці для пояснення ряду експериментальних даних елементарної частинки в тому числі і електрон розглядають не лише як частинку але і як хвилю де Бройля. Тобто електрон можна характеризувати значеннями енергії E та імпульсу p , а також і довжиною хвилі λ , частотою ω і хвильовим вектором k :

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar},$$

а модуль

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

як це робиться для хвилі. Тоді енергія

$$E = \hbar\omega,$$

а

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

та

$$p = \hbar k.$$

Тоді рух вільних електронів може бути описаний плоскою хвилею де Бройля з постійною амплітудою A , тобто

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}. \quad (149.2)$$

Важливий зміст має

$$|\psi|^2 = \psi\psi^*, \quad (149.3)$$

де ψ^* - комплексно-спряжена величина, яка дає нам ймовірність перебування електрона в даній точці простору з координатою r .

В принципі, задаючи $U_0(r)$ і квантово-механічні граничні умови можна знайти хвильову функцію $\psi(r)$ та енергію (або енергетичний спектр) частинки.

Розглянемо тепер кристал, він представляє собою систему, що складається з багатьох електронів та атомних ядер. Найбільш повні відомості про властивості такої системи можна отримати, якщо розв'язати рівняння Шредінгера, що відповідає стаціонарним станам такої системи. Тобто треба розв'язати рівняння Шредінгера виду:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (149.4)$$

де $\hat{H}$ - оператор Гамільтона всіх електронів і всіх ядер кристалу; E -

значення повної енергії всієї цієї системи; ψ - це хвильова функція, що залежить від координат усіх електронів і ядер кристалу, тобто

$$\psi = \psi(\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha). \quad (149.5)$$

В принципі знаючи хвильову функцію можна розрахувати всі властивості кристалу. Запишемо тепер оператор $\hat{H}$ в такому вигляді:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{ez} + \hat{U}_{zz}, \quad (149.6)$$

де $\hat{T}_e$ - оператор кінетичної енергії електронів; $\hat{T}_z$ - оператор кінетичної енергії ядер; $\hat{U}_{ee}$ - оператор потенціальної енергії взаємодії електронів з електронами; $\hat{U}_{ez}$ - оператор потенціальної енергії взаємодії електронів з ядрами; $\hat{U}_{zz}$ - оператор потенціальної енергії взаємодії ядер з ядрами.

У явному вигляді H :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,z \\ i \neq j}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \sum_{i,\alpha} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{R}_{\alpha} - \vec{r}_i)} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}e}{4\pi\epsilon_0(\vec{R}_{\alpha} - \vec{R}_{\beta})}, \end{aligned} \quad (149.7)$$

де Z - порядковий номер елемента; e - заряд електрона; r_i, r_j - координати електронів; R_{α}, R_{β} - координати ядер; m - маса електрона; M - маса ядра.

Якщо кристал перебуває в зовнішньому полі, то до виразу (149.7) в принципі ще додаються потенціальні енергії електронів і ядер в цьому полі. Вираз (149.7) підставимо у вираз (149.4), тоді число змінних в рівнянні Шредінгера буде $10^{23} - 10^{24}$. Якщо в кристалі N атомів, то буде $3N$ координат ядер, ZN електронів, отже, $3ZN$ координат електронів. Тобто, всіх змінних:

$$\begin{aligned} 3N + 3ZN &= 3N(Z + 1); \\ Z = 50; N &\approx 10^{23} \Rightarrow \approx 10^{25}. \end{aligned}$$

Таким способом рівняння Шредінгера розв'язати точно неможливо. Завдання теорії полягає у тому, щоб знайти такі наближення, які б дозволяли знайти розв'язки рівняння (149.4) зберігши його принципові риси, що відрізняють кристал від окремих атомів. Перше таке наближення називається *адіабатичне наближення*, тобто квантовомеханічний підхід, за якого частинки

фізичної системи поділяються на важкі та легкі. Спочатку розглядаються швидкі процеси з легкими частками, вважаючи важкі частки нерухомими, а потім розглядається рух важких часток в усередненому полі легких.

Адіабатичне наближення. Відомо, що маса електрона майже в 2000 разів менша за масу ядра, тому рух електронів в кристалі настільки швидкий, що вони практично безінерційно слідує за повільним рухом важких ядер. Рух ядер реагує лише на усереднену в просторі і часі зміну положення ядер, тоді рух електронів визначається тією конфігурацією ядер, яка є в даний момент. Це дає можливість у рівнянні Шредінгера розглядати координати ядер R_α , як параметри, що повільно змінюються. Саме грубе припущення полягає в тому, що координати ядер вважають взагалі сталими ($\vec{R}_\alpha = \text{const}$). Оскільки $\hat{T}_Z = 0$, а потенціальна енергія ядер $U_{zz} = \text{const}$, то її можна обрати за початок відліку, тобто можна вважати, що $U_{zz} = 0$.

Тоді для оператора $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{U}_{ez} + \hat{U}_{ee}. \quad (149.8)$$

Таким чином, прийнявши дане наближення можна вважати рух електронів і ядер незалежним. Тобто такими, що відбуваються без обміну енергією між електронною і ядерною підсистемою. В цьому і полягає зміст *адіабатичного наближення* - процес без обміну енергією з зовнішнім середовищем. Критерій адіабатичного розширення

$$\zeta = \sqrt[4]{\frac{m_i}{M_\alpha}} \approx \frac{1}{7}.$$

В ряді задач адіабатичного наближення недостатньо. Тоді користуються іншими методами.

Одноелектронне наближення. В рівнянні Шредінгера з врахуванням оператора (149.8) число змінних все ще залишається великим. Структура оператора Гамільтона така, що за деяких припущень його можна буде представити у вигляді суми операторів Гамільтона для кожного електрона. Запишемо рівняння Шредінгера з оператором (149.8).

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) - \sum_i \sum_Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_\alpha - \vec{r}_i|} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi(r_i, R_\alpha) = E \psi(r_i, \vec{R}_\alpha). \quad (149.9)$$

Завдання буде полягати в тому, щоб вираз (149.9) привести до вигляду:

$$\sum_i \hat{H}_i \psi(\vec{r}_i) = E\psi(\vec{r}_i). \quad (149.10)$$

Тоді повна енергія представляється у вигляді суми:

$$E = \sum_i E_i, \quad (149.11)$$

а хвильова функція всієї системи електронів представляється у вигляді добутку одночастинкових функцій. Перші два доданки оператора Гамільтона (149.9) задовольняють умові (149.10), третій цій умові не задовольняє. Тому робиться таке наближення: вважається, що кожний електрон рухається в деякому полі, яке утворене всіма іншими електронами, а також ядрами. Потенціальну енергію усієї цієї взаємодії електронів з таким полем позначають Ω_i^{eff}

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \Rightarrow \sum_i \Omega_i^{eff}.$$

Тоді вираз (149.9) можна записати у такому вигляді:

$$\sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \left(-\sum_{\alpha} \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_{\alpha} - \vec{r}_i|} + \Omega_i^{eff} \right) \right] \psi = E\psi. \quad (149.12)$$

Позначивши в дужках через

$$V_i(\vec{r}_i) = \left(-\sum_{\alpha} \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_{\alpha} - \vec{r}_i|} + \Omega_i^{eff} \right)$$

можна рівняння Шредінгера (149.12) переписати у вигляді:

$$\sum_i \hat{H}_i \psi_i = \sum_i E_i \psi_i, \quad (149.13)$$

де $\hat{H}_i$ - це оператор записаний для одного електрона, тобто

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}_i). \quad (149.14)$$

Тоді рівняння Шредінгера з оператором $\hat{H}_i$ буде мати вигляд:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}_i) \right] \psi_i(\vec{r}_i) = E_i(\vec{r}_i). \quad (149.15)$$

Рівняння (149.15) записане для одного електрона, що перебуває в кристалі. В рівнянні (149.15) індекс (i) можна упустити, оскільки воно справедливе для будь-якого електрона

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_i(\vec{r}_i) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (149.16)$$

Вираз (149.16) називається *рівнянням Шредінгера для кристалу в одноелектронному наближенні*. Таким чином, шляхом адіабатичного наближення, одноелектронного наближення, яке полягало у введенні потенціалу (самоузгодженого Ω_i), (потенціал Хартрі-Фокса), ми перейшли від рівняння Шредінгера з числом змінних $\approx 10^{25}$ до порівняно простого рівняння Шредінгера (149.16). У ньому $V(r)$ - це потенціальна енергія електрона в будь-якій точці кристалу.

Існують наближені методи за допомогою яких можна з'ясувати поведінку функції $V(r)$ враховуючи симетрію кристалу. Тоді можна розв'язати рівняння (149.16) і отримати значення енергії електрона та його хвильову функцію. Очевидно, що функція $V(r)$ - це періодична функція в ідеальному кристалі, в якій період зміни співпадає з періодом кристалічної ґратки.

Метод ефективної маси. Для ряду матеріалів наприклад, напівпровідників і діелектриків розв'язок рівняння Шредінгера можна отримати досить наближеними методами.

1. Теорема Блоха.

Розв'язком рівняння Шредінгера (149.16) для електрону в кристалі, де внаслідок трансляційної симетрії

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{n}) \quad (149.17)$$

є хвильова функція (n - один з векторів). Тоді

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (149.18)$$

амплітуда, якої періодична з періодом кристалічної ґратки, тобто

$$U_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r} + \vec{n}). \quad (149.19)$$

Отже, теорема Блоха стверджує, що розв'язком одноелектронного рівняння Шредінгера (149.16) в кристалі буде хвильова функція, що описує плоску хвилю з амплітудою, яка модельована з періодом кристалічної ґратки. Таким чином, на відміну від вільного електрона, який описується хвильовою функцією, плоскою хвилею з сталою амплітудою, електрон в кристалі описується хвильовою функцією, яка змінюється з періодом кристалічної ґратки. Хвильова функція (149.18) називається *блехівською хвильовою функцією*. З виразу (149.18) видно, що блехівська хвильова функція залежить не тільки від $\vec{r}$, а також від хвильового вектора $\vec{k}$.

Квазіімпульс. Відомо, що кожному значенню симетрії

відповідає свій інтеграл руху, величина, яка не змінюється з часом. Тобто однорідності часу відповідає інтеграл енергії (закон збереження енергії); однорідності простору - інтеграл імпульсу (закон збереження імпульсу); ізотропності простору (закон збереження моменту імпульсу).

В кристалі є особливий тип симетрії - трансляційна симетрія. Можна показати, що цьому типу симетрії буде відповідати інтеграл руху для електрона в кристалі, що називається *квазіімпульсом*

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}. \quad (149.20)$$

Тоді для квазіімпульсу буде виконуватись умова (в ідеальному кристалі)

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = 0. \quad (149.21)$$

Тепер, проаналізуємо вирази (149.20) і (149.21). Вираз (149.21) означає, що в кристалі величина квазіімпульсу зберігається з часом і за величиною і за напрямом. Отже, буде зберігатись і хвильовий вектор $\vec{k}$ електронної хвилі і за величиною і за напрямом. А це означає (з виразу (149.21)), що в ідеальному кристалі електронні хвилі не розсіюються. Тому, інколи вираз (149.21) вважають аналогом першого закону Ньютона.

Можна показати, що якщо в кристалі є порушення періодичності, то відношення

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} \quad (149.22)$$

буде неперіодичне.

Це сила, що діє на електрон з боку всіх дефектів і отже, спричиняє розсіювання електронної хвилі, тобто призводить до появи електричного опору. Навіть коливання кристалічної ґратки вже є порушенням періодичності і вони самі по собі можуть призводити до розсіювання електронних хвиль.

Причини введення квазіімпульсу. Його вводять для того, щоб рівняння руху електрона в кристалі мали максимальний простий вигляд. Тобто, щоб можна було не враховувати дію на електрони сили з боку періодично розташованих атомів ґратки, тобто з боку періодичності потенціалу. Оскільки хвильова функція (149.18), яка є розв'язком рівняння Шредінґера (149.16) істотним чином залежить від хвильового вектора $\vec{k}$, то дане значення енергії $\mathcal{E}$ теж буде залежати від $\vec{k}$.

Залежність $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\vec{k})$ називається *законом дисперсії*. Можна показати, що $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\vec{k})$ є функція парна.

Власне, сама назва «квазіімпульс» пов'язана з тим, що квазіімпульс $\vec{p}$ визначає стан електрона в кристалі неоднозначно. Тобто, одному і тому ж значенню квазіімпульсу може відповідати велика кількість однакових станів. А саме хвильові вектори $\vec{k}, \vec{k} + \vec{g}$

$$\vec{n}\vec{g} = 2\pi Q,$$

де $Q = 0, 1, 2, \dots$.

Хвильові вектори $\vec{k}, \vec{k} + \vec{g}$ будуть описувати стани з однаковою хвильовою функцією. Пізніше ми покажемо, ще один з векторів оберненої ґратки.

Повернемося тепер до розв'язку рівняння Шредінґера (149.16) методом ефективної маси. Зміст цього методу полягає в тому, що для достатньо плавного потенціалу $V(\vec{r})$ рівняння Шредінґера (149.16) в принципі з невідомим потенціалом можна замінити рівнянням

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi_k(\vec{r}) = \mathcal{E}_k \psi_k(\vec{r}) \quad (149.23)$$

в якому маса вільного електрона замінена на іншу m^* - ефективну масу. Зате в рівнянні Шредінґера (149.23) відсутній потенціал. Але розв'язки і власні значення рівнянь (149.16) і (149.23) будуть однаковими

$$\mathcal{E}_k = \frac{\pi^2 k^2}{2m} \alpha,$$

а хвильова функція

$$\psi_k \sim e^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

Таким чином, метод ефективної маси дає можливість отримати розв'язок рівняння Шредінґера для електрона в кристалі не маючи самого виду потенціалу, але із заміною маси на ефективну масу. Зрозуміло тоді, що ефективна маса електрона в кристалі і буде нести всю необхідну інформацію про періодичний потенціал кристалічної ґратки. Якщо в кристалі присутні порушення періодичності, такі, що їх потенціал слабо змінюється на відстанях порядку розмірів елементарної комірки, то виявляється, що і в цьому випадку можна отримати наближений розв'язок рівняння Шредінґера (149.16). Тоді за наявності порушень періодичності потенціалу рівняння Шредінґера буде мати вигляд:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 V_{\text{період}}(\vec{r}) + V_{\text{неперіод}}(\vec{r}) \right] \psi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \psi_k(\vec{r}). \quad (149.24)$$

Було показано, що коли представити хвильову функцію $\psi_k(\vec{r})$

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) F(\vec{r}), \quad (149.25)$$

то рівняння (149.24) і рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{\text{неперіод}}(\vec{r}) \right] F(\vec{r}) = \varepsilon_k F(\vec{r}) \quad (149.26)$$

будуть мати однакові власні значення.

У цьому випадку за рахунок введення ефективної маси m^* вдається позбутися дуже незручного у обчисленнях періодичного потенціалу $V_{\text{період}}(\vec{r})$. Таким чином, метод ефективної маси дає можливість розв'язати рівняння Шредінгера для електрона в кристалі та знайти власні значення енергії й хвильову функцію електрона в кристалі.

Приклад. Якщо $V_{\text{неперіод}}(\vec{r})$ має кулонівський вигляд:

$$V_{\text{неперіод}}(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}, \quad (149.27)$$

то в цьому випадку вираз (149.26) буде мати такий же вигляд як для електрона в атомі водню

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right] F(\vec{r}) = \varepsilon_k F(\vec{r}). \quad (149.28)$$

У цьому випадку значення енергії будуть пропорційними:

$$\varepsilon \sim -\frac{1}{n^2},$$

де $n = 1, 2, 3, \dots$

Хвильова функція $F(\vec{r})$ може бути представлена у вигляді водневоподібної хвильової функції

$$F(\vec{r}) = R_n(\vec{r}) Y_{em}(\theta, \varphi). \quad (149.29)$$

Домішки відповідного типу називаються *воднеподібними*, для яких за допомогою хвильової функції (149.29) можна розрахувати кількість параметрів.

§150. Оборнена ґратка. Зони Бріллюена

Ґратці кожного кристалу відповідає ґратка - базисні вектори, яку визначають через вектори відповідної прямої ґратки - ґратки Браве за таким співвідношенням:

$$b_1 = 2\pi \frac{[\vec{a}_2 \vec{a}_3]}{(\vec{a}_1 [\vec{a}_2 \vec{a}_3])} \quad \begin{array}{l} \leftarrow \text{векторний добуток} \\ \leftarrow \text{змішаний добуток} \end{array}; \quad (150.1)$$

$$b_2 = 2\pi \frac{[\vec{a}_2 \vec{a}_1]}{(\vec{a}_1 [\vec{a}_2 \vec{a}_3])}; \quad (150.2)$$

$$b_3 = 2\pi \frac{[\vec{a}_1 \vec{a}_2]}{(\vec{a}_1 [\vec{a}_2 \vec{a}_3])}. \quad (150.3)$$

Дані вирази дають об'єм деякого паралелепіпеда. Ґратка побудована на цих векторах називається *оберненою*. Вузли цієї ґратки визначаються векторами:

$$\vec{b} = l_1 \vec{b}_1 + l_2 \vec{b}_2 + l_3 \vec{b}_3, \quad (150.4)$$

де l_1, l_2, l_3 - довільні цілі числа.

Зауваження: об'єм оберненої ґратки пов'язаний з об'ємом прямої ґратки, таким простим співвідношенням:

$$V_{\vec{b}}(\vec{b}_1 [\vec{b}_2 \vec{b}_3]) = \frac{(2\pi)^3}{V_{\vec{a}}}. \quad (150.5)$$

Із співвідношень (150.1), (150.2), (150.3) випливає, що скалярний добуток векторів прямої і оберненої ґратки

$$(\vec{a}_i \vec{b}_j) = 2\pi \delta_{ij}, \quad (150.6)$$

де δ_{ij} - символ Кронекера.

Знайдемо тепер добуток векторів $(\vec{n} \vec{b})$. Вектор $\vec{n}$ ми задаємо умовою:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3.$$

Тоді

$$(\vec{n} \vec{b}) = 2\pi(n_1 l_1 + n_2 l_2 + n_3 l_3) = 2\pi Q. \quad (150.7)$$

Порівнюючи попередній результат з формулою попереднього параграфа

$$(\vec{n} \vec{g}) = 2\pi Q$$

можна зробити висновок, що дійсно вектор $\vec{g}$ з яким квазіімпульс періодичний є вектором оберненої ґратки.

Це означає, що квазіімпульс та хвильовий вектор періодичний з вектором оберненої ґратки. Тобто стани з хвильовими векторами $\vec{k}$ і $\vec{k} + \vec{g}$ є фізично еквівалентні. В свою чергу квазіімпульси та хвильові вектори, які відрізняються на вектор оберненої ґратки називаються *еквівалентними*. Тоді зрозуміло, що у k - або у p -просторі побудувати обернену ґратку з базисом b_1, b_2, b_3 , то весь простір розіб'ється на області сукупність точок яких являє собою або визначає фізично

еквівалентні стани. Такі області називаються *зонами Бріллюена*. Об'єм кожної зони визначається за формулою (150.5).

Першою або основою зоною Бріллюена називається мінімальний за об'ємом многогранник побудований навколо початку координат в k - або p -просторі і який містить всі можливі стани. Припустимо, що такий многогранник побудований. Якщо до всіх точок k , що містяться в ньому, додати різні вектори оберненої ґратки b , то в принципі можна отримати всі можливі точки k -простору. І навпаки, довільну точку k -простору можна привести в першу зону Бріллюена за допомогою деякого вектора оберненої ґратки.

Висновок. Таким чином, за допомогою поняття про зони Бріллюена можна стверджувати, що всі можливі стани електрона в кристалі з самими різними значеннями хвильового вектора $\vec{k}$ будуть лежати в основній або першій зоні Бріллюена. Для кристала з простою кубічною ґраткою об'єм першої зони Бріллюена дорівнює:

$$V_b = \frac{(2\pi)^3}{a^3}. \quad (150.8)$$

Тоді межі зони Бріллюена можна визначити таким співвідношенням:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}; \quad -\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a}; \quad -\frac{\pi}{a} \leq k_z \leq \frac{\pi}{a}; \quad (150.9)$$

Зрозуміло, що вираз (150.9) буде записуватись:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_i \leq \frac{\pi}{a},$$

де $i = x, y, z$.

Із еквівалентності точок в різних зонах Бріллюена випливає, що під час розгляду руху частинок в k -просторі можна розглядати їх траєкторії тільки в межах першої зони Бріллюена. Інколи її ще називають *приведеною зоною Бріллюена*.

Лекція 43. ДИНАМІКА КРИСТАЛІЧНОЇ ҐРАТКИ

§151. Коливання простої одномірної ґратки.

§152. Коливання складної одномірної ґратки.

§153. Нормальні координати для простої одномірної ґратки.

§154. Коливання тривимірної ґратки.

[2. §6-§9; 4. §1; 5. §6.1-§6.3]

§151. Коливання простої одномірної ґратки

Тільки для $T = 0$, атоми кристалічної ґратки знаходились би в стані спокою і то тільки за умови, якщо можна знехтувати енергією нульових координат. Якщо $T \neq 0$, то атоми кристалічної ґратки коливаються навколо вузлів положення рівноваги і чим більша температура тим більша амплітуда коливань.

Ми почали вивчення динаміки коливання кристалічної ґратки на прикладі одномірної ґратки утвореної з однакових атомів. Побачимо, що основні закономірності будуть справедливі у випадку тривимірної ґратки.

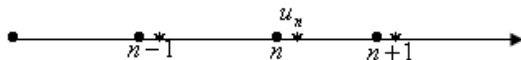


Рис. 170

Виберемо напрямок в одномірному кристалі, як показано на рисунку 170. Нехай атоми зміщуються з положення рівноваги внаслідок коливань, які на рисунку позначені (*). Зміщення n -го атома з положення рівноваги будемо позначати u_n і $u_n > 0$, якщо напрямок співпадає з напрямком осі. Запишемо напрямок руху n -го атома

$$m\ddot{u}_n = F_n, \quad (151.1)$$

де F_n - це сила, яка діє на n -ий атом з боку всіх інших.

Для опису взаємодії між атомами в процесі коливань введемо два наближення:

1. Будемо вважати, що взаємодіють між собою тільки найближчі сусідні атоми, нехтуючи дією всіх інших атомів.

2. Будемо вважати, що зміщення атомів від положення рівноваги

$$u_n \ll a_0,$$

де a_0 - віддаль між сусідами.

Виявляється, що для зроблених наближень сила, що діє на атом (n -ий) буде пропорційна зміні віддалі між ними ($F \sim kx$). Тому вказані наближення називаються *гармонічними*.

Запишемо силу, яка діє на n -ий атом з боку $n + 1$. Якщо через β позначити коефіцієнт квазіпружної сили, то можна записати, що

$$f_{n,n+1} = -\beta(u_n - u_{n+1}). \quad (151.2)$$

Аналогічно

$$f_{n,n-1} = -\beta(u_n - u_{n-1}). \quad (151.3)$$

Таким чином, рівняння (151.1) можна переписати у вигляді:

$$m\ddot{u}_n = f_{n,n+1} + f_{n,n-1} \quad (151.4)$$

або після підстановки виразів (151.3) і (151.2) у вираз (151.4), запишемо:

$$m\ddot{u}_n = -\beta(u_n - u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (151.5)$$

Вираз (151.5) - рівняння руху n -го атома, у яке входять зміщення $n + 1$ і $n - 1$ атома. Тому необхідно розв'язати сумісну систему рівнянь для руху кожного атома. Причому всі рівняння будуть типу (151.5). Щоб перейти до розв'язку рівняння (151.5) розглянемо неперервну струну. З теорії коливань відомо, що диференціальному рівнянню коливання струни задовольняє такий розв'язок:

$$u(x, t) = Ae^{i(qx - \omega t)}, \quad (151.6)$$

де q - це хвильовий вектор коливань $\left(q = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$; ω - циклічна частота коливань $\left(\omega = \frac{2\pi}{T}\right)$.

За аналогією з виразу (151.6) будемо шукати розв'язок рівняння (151.5), замінивши у виразі (151.6) $x = an$.

Тому розв'язок будемо писати у вигляді:

$$u_n = Ae^{i(qan - \omega t)}. \quad (151.7)$$

Підставивши рівність (151.7) у вираз (151.5) і скоротивши на експоненту, отримаємо:

$$-m\omega^2 = -\beta[2 - e^{-iqa} - e^{iqa}], \quad (151.8)$$

де $\beta > 0$.

Бачимо, що рівняння (151.7) буде задовольняти вираз (151.5), якщо частота ω задовольняє рівнянню (151.8). Рівняння (151.8) дає нам закон дисперсії, тобто залежність $\omega = \omega(q)$. З виразу (151.8) видно, що

$$\omega^2 = \frac{\beta}{m}(2 - 2 \cos qa) = 2 \frac{\beta}{m} 2 \sin^2 \frac{qa}{2}. \quad (151.9)$$

Тоді

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|}, \quad (151.10)$$

$$e^{\pm ix} = \cos x \pm i \sin x.$$

Вираз (151.10) задає ті можливі частоти з якими можуть коливатися атоми кристалічної одноатомної ґратки в залежності від хвильового числа. Можна показати, що стани з хвильовими числами

q та

$$q' = q + \frac{2\pi}{a}Q \quad (151.11)$$

фізично еквівалентні.

З виразу (151.11) видно, що вектор $\frac{2\pi}{a}$ один з векторів оберненої ґратки. Тому тут як і в попередньому параграфі можна ввести поняття приведених хвильових векторів (аналоги зони Бріллюена) значення, яких як і раніше будуть лежати в межах

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}.$$

Розглянемо тепер чим будуть відрізнятися коливання струни від коливань лінійного ланцюжка атома. Для струни хвильове число приймає значення $0 < q < \infty$, що відповідає можливим довжинам хвиль $0 < \lambda < \infty$. А в ланцюжку атомів

$$q_{\min} = 0; q_{\max} = \frac{\pi}{a}.$$

Бачимо, що обмеження на хвильове число (на $q_{\max}$) повинно накласти обмеження на можливі довжини хвиль, які можуть поширюватись в кристалічній ґратці. Очевидно, що $q_{\max}$ відповідає мінімальній довжині хвилі

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi}{q_{\max}} = \frac{2\pi}{\frac{\pi}{a}} = 2a. \quad (151.12)$$

Тобто мінімальна довжина хвилі, яка може поширюватись по кристалічній ґратці дорівнює $2a$. Пояснимо це фізично. З фізичної точки зору зрозуміло, що довжина хвилі $\lambda < 2a$ не буде мати фізичного змісту, тому в такій хвилі не буде чому зміщуватись (рис. 171).



Рис. 171

У випадку неперервної струни $\omega = v_0|q|$. У нашому випадку можливі частоти, обмежені і не має прямої пропорційності. Тому, що у нас $\omega \approx \sin \frac{qa}{2}$.

В цьому випадку кажуть, що має місце дисперсія, тобто хвилі різної довжини (з різними q будуть мати різну швидкість поширення). Можна ввести для хвилі дві швидкості: *фазову швидкість*

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{|q|}, \quad (151.13)$$

яка характеризує швидкість поширення даної фази і *групову*

$$v_{\text{гр}} = \left| \frac{d\omega}{dq} \right|, \quad (151.14)$$

яка характеризує поширення енергії. За відсутності дисперсії, коли $\omega = v_0(q)$, то $v_{\text{гр}} = v_{\phi} = v_0$. Під час наявності дисперсії ці швидкості будуть різними.

Зауваження: до цих пір ми розглядали безмежний одномірний кристал. Розглянемо тепер обмеження одномірного кристалу. Тоді атоми, що будуть перебувати в середині такого кристалу практично не будуть відчувати границі кристалу. Тому для зручності обчислень граничні умови, що накладаються на кристал замінюються умовами циклічності G (для G -атомів)

$$U_n = U_{n+G}. \quad (151.15)$$

Якщо підставити вираз (151.15) у рівність (151.7), то отримаємо:

$$U_{n+G} = A e^{i[qan+qaG-\omega t]}.$$

Ця рівність означає:

$$A e^{i(qan-\omega t)} = A e^{i[qan+qaG-\omega t]}. \quad (151.16)$$

Скорочуючи рівність

$$e^{igaG} = 1. \quad (151.17)$$

Умова виразу (151.17) означає, що

$$qaG = 2\pi g, \quad (151.18)$$

де g - довільне ціле число ($g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Звідки

$$q = \frac{2\pi}{aG} g. \quad (151.19)$$

З умови виразу (151.19) видно, що вектор $\vec{q}$ може приймати тільки ряд дискретних значень, тобто він квантується. Отже, у випадку одномірної ґратки всі можливі значення хвильового вектора будуть квантовані і будуть виражатись співвідношенням (151.19). Приведене значення хвильового вектора буде задовольняти умові:

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (151.20)$$

Якщо співвідношення (151.19) підставити в рівняння (151.20), то легко одержати границі в яких змінюється число

$$-\frac{\pi}{a} \leq \frac{2\pi}{aG} g \leq \frac{\pi}{a}. \quad (151.21)$$

Скоротивши на a і помноживши на $\frac{1}{2}G$, тоді вираз (151.21) прийме вигляд:

$$-\frac{G}{2} \leq q \leq \frac{G}{2}. \quad (151.22)$$

Таким чином, для скінченного одномірного кристалу, який містить G атомів хвильовий вектор $\vec{q}$ приймає теж G різних значень.

§152. Коливання складної одномірної ґратки

Розглянемо безмежну одномірну ґратку, яка побудована із атомів різного сорту з масами m' і m'' відповідно (рис. 172).

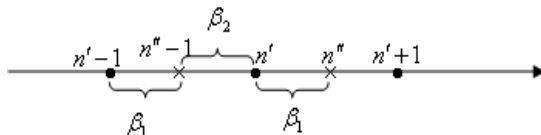


Рис. 172

Позначимо зміщення n' через u'_n , а зміщення атома n'' будемо позначати через u''_n . Коефіцієнт квазіпружної сили між атомами позначимо β_1 і β_2 . Запишемо рівняння руху атома n' в тих же наближеннях, що і для простої одномірної ґратки:

1. Обмежимося взаємодією тільки сусідніх атомів.
2. Врахуємо наближення малих коливань.

Тоді рівняння руху буде мати вигляд:

$$m' \ddot{u}'_n = F_{n'}, \quad (152.1)$$

де m'_n - маса n' -ої частинки в ґратці; $\ddot{u}'_n$ - прискорення n' -ої частинки; $F_{n'}$ - сила, що діє на n' -у частинку або сила з боку n' атома.

Формула (152.1) описує динаміку частинки в складній одномірній ґратці. Розглянемо її детальніше.

Ця формула є рівнянням руху для n' -ої частинки в ґратці і слідує з другого закону Ньютона:

$$F = ma,$$

де F - сила, що діє на тіло; m - маса тіла; a - його прискорення.

Для складної одномірної ґратки це рівняння враховує той факт, що маси частинок можуть бути різними (позначені як m'_n), і кожна частинка може відчувати силу $F_{n'}$, яка може бути різною для різних частинок і залежить від взаємодії з сусідніми частинками та зовнішніх сил.

Такі рівняння часто використовуються в фізиці твердого тіла

для опису руху атомів або іонів в кристалічних ґратках. Вони можуть бути вирішені для знаходження власних частот і власних мод коливань ґратки. Це важливо для розуміння її динамічних властивостей, таких як теплоємність і теплопровідність.

Причому

$$F_n = f_{n'n''} + f_{n'n''-1}. \quad (152.2)$$

Розпишемо сили, які входять у рівність (152.2)

$$f_{n'n''} = -\beta_1(u'_n - u''_n), \quad (152.3)$$

$$f_{n'n''-1} = -\beta_2(u'_n - u''_{n-1}). \quad (152.4)$$

Після підстановки виразів (152.2), (152.3), (152.4) у рівність (152.1), маємо

$$m''\ddot{u}'_n = -\beta_1(u'_n - u''_n) - \beta_2(u'_n - u''_{n-1}). \quad (152.5)$$

Цілком аналогічно, можна записати рівняння коливань атома n'' . Воно буде мати вигляд:

$$m''\ddot{u}''_n = -\beta_2(u''_n - u'_{n+1}) - \beta_1(u''_n - u'_n). \quad (152.6)$$

Як і в попередньому параграфі в рівняння руху n -го атома ввійшли зміщення $n+1$ і $n-1$ атомів. Тобто рівняння (152.5) і (152.6) представляють собою систему зв'язаних між собою диференціальних рівнянь. Будемо шукати розв'язок цієї системи за аналогією з попереднім параграфом у вигляді:

$$u'_n = A'e^{i(qan' - \omega t)}, \quad (152.7)$$

$$u''_n = A''e^{i(qan'' - \omega t)}. \quad (152.8)$$

Підставимо вирази (152.7) і (152.8) у вираз (152.5). Після скорочення отримаємо:

$$-m'\omega^2 A' = -\beta_1(A' - A'') - \beta_2(A' - A''e^{-iqa}). \quad (152.9)$$

Співвідношення (152.9) запишемо так:

$$(-m'\omega^2 + \beta_1 + \beta_2)A' - (\beta_1 + \beta_2e^{-iqa})A'' = 0. \quad (152.10)$$

В рівнянні (152.10) розділимо на m' і поміняємо знак

$$\left(\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'}\right)A' + \left(\frac{\beta_1 + \beta_2e^{-iqa}}{m'}\right)A'' = 0. \quad (152.11)$$

Якщо підставити рівності (152.7), (152.8) у вираз (152.6), то аналогічно можна отримати:

$$\left(\frac{\beta_1 + \beta_2e^{-iqa}}{m''}\right)A' + \left(\omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m''}\right)A'' = 0. \quad (152.12)$$

Вирази (152.11) і (152.12) - це система рівнянь для знаходження амплітуд A' і A'' . Відомо, що однорідна система має нетривіальний розв'язок. Якщо система однорідних рівнянь має нетривіальний

розв'язок, тоді її визначник дорівнює нулю

$$\left| \begin{array}{cc} \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m'} \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa}}{m'} & \\ \frac{\beta_1 + \beta_2 e^{-iqa}}{m''} \omega^2 - \frac{\beta_1 + \beta_2}{m''} & \end{array} \right| = 0. \quad (152.13)$$

Розкриємо тепер визначник виразу (152.13)

$$(\omega^2)^2 - \omega^2 \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m' + m'')}{m'm''} - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa}{m'm''} = 0. \quad (152.14)$$

Скористаємось формулою Ейлера для експоненти

$$\omega_0^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)(m' + m'')}{m'm''}. \quad (152.15)$$

Вільний член рівності (152.14) перепишемо в такому вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{(\beta_1 + \beta_2)^2 - \beta_1^2 - \beta_2^2 - 2\beta_1\beta_2 \cos qa}{m'm''} &= \frac{2\beta_1\beta_2(1 - \cos qa)}{m'm''} = \\ &= \frac{4\beta_1\beta_2}{m'm''} \sin^2 \frac{qa}{2} \equiv \gamma_0^2. \end{aligned} \quad (152.16)$$

Таким чином, з врахуванням позначень у виразах (152.15) і (152.16), рівняння (152.14) набуває такого вигляду:

$$(\omega^2)^2 - \omega_0^2 \omega^2 + \gamma_0^2 = 0. \quad (152.17)$$

Розв'язок рівняння (152.17) буде таким:

$$\omega^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \pm \sqrt{\frac{\omega_0^4}{4} - \gamma_0^2}. \quad (152.18)$$

Вираз (152.18) перепишемо у вигляді:

$$\omega^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4}} \right]. \quad (152.19)$$

Оскільки ω_0 - це частота і істотно додатна, то вираз (152.19) буде мати тільки два корені

$$\omega_1 = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4}}}, \quad (152.20)$$

$$\omega_2 = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4}}}. \quad (152.21)$$

Обчислимо тепер коефіцієнт $\frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4}$

$$\frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4} = \frac{16\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2} (m'm'')^2}{m'm''(\beta_1 + \beta_2)^2(m' + m'')^2} = \frac{16\beta_1\beta_2 m'm'' \sin^2 \frac{qa}{2}}{(\beta_1 + \beta_2)^2(m' + m'')^2}, \quad (152.22)$$

$$\frac{16\beta_1\beta_2 m'm''}{(\beta_1 + \beta_2)^2(m' + m'')^2} = \gamma^2, \quad (152.23)$$

$$\frac{4\gamma_0^2}{\omega_0^4} = \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}. \quad (152.24)$$

Після введення цих позначень частоти, вирази (152.20) і (152.21) можна записати у вигляді:

$$\omega_1 = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}; \quad (152.25)$$

$$\omega_2 = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}. \quad (152.26)$$

Пізніше покажемо, що $\gamma^2 \leq 1$ набуває максимуму тоді, коли $m' = m''$. Перший корінь виразу (152.25) для частот на основі причин, які будуть з'ясовані пізніше називають *оптичною віткою коливань*. Коливання, що будуть відповідати цим частотам називаються відповідно *оптичними коливаннями*. Другий корінь рівності (152.26) називається *акустичною віткою коливань*. Відповідно коливання, які відповідають цим частотам називаються *акустичними коливаннями*. Тому вирази (152.25) і (152.26) можна записати у вигляді:

$$\omega_{\text{опт.}} = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}; \quad (152.27)$$

$$\omega_{\text{акуст.}} = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}}. \quad (152.28)$$

Розглянемо відмінності між акустичною і оптичною віткою коливань. За умови, що $q = 0$ для

$$\left. \begin{array}{ll} \text{акустичних коливань} & \omega_{\text{акуст.}}(0) = 0, \\ \text{оптичних коливань} & \omega_{\text{опт.}}(0) = \omega_0. \end{array} \right\} \quad (152.29)$$

Таким чином, значення хвильового вектора і частота акустичних коливань дорівнюють 0, а оптичних – деякому значенню

ω_0 .

Розглянемо тепер максимально можливе значення хвильового вектора і частоту, яка йому відповідає за умови $q = \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{cases} \omega_{\text{акуст.}}\left(\frac{\pi}{2}\right) = \left(\frac{\omega_0}{2}\right) \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}}, \\ \omega_{\text{опт.}}\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{\omega_0}{2} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}} > \omega_{\text{акуст.}}\left(\frac{\pi}{2}\right). \end{cases} \quad (152.30)$$

Розглянемо який вигляд буде мати закон дисперсії для малих значень хвильового вектора:

$$\frac{qa}{2} \leq 1,$$

тоді

$$\sin \frac{qa}{2} \approx \frac{qa}{2},$$

$$\omega_{\text{акуст.}}(q) = \frac{\omega_0}{2} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \frac{\gamma^2 q^2 a^2}{4}}}. \quad (152.31)$$

Скориставшись тим, що

$$x \ll 1; \quad \sqrt{1 - x} \approx 1 - \frac{1}{2}x, \quad (152.32)$$

а також, що

$$\omega_{\text{акуст.}}(q) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - 1 + \frac{1}{2} \frac{\gamma^2 q^2 a^2}{4}} = \frac{\omega_0}{4} \gamma q a. \quad (152.33)$$

Таким чином, для малих хвильових векторів в акустичній вітці як і в простій одномірній ґратці, частота пропорційна хвильовому вектору, тобто дисперсія відсутня.

Розглянемо тепер оптичну вітку в тих же наближеннях

$$\begin{aligned} \omega_{\text{опт.}}(q) &= \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + 1 - \frac{\gamma^2 q^2 a^2}{8}} = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{\gamma^2 q^2 a^2}{16}} \approx \\ &\approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma^2 q^2 a^2}{32}\right). \end{aligned} \quad (152.34)$$

Таким чином, для оптичної вітки коливань для малих значень хвильового вектора, частота буде слабо змінюватись за параболічним законом. Побудуємо тепер графічну залежність частоти від хвильового вектора (рис. 173).

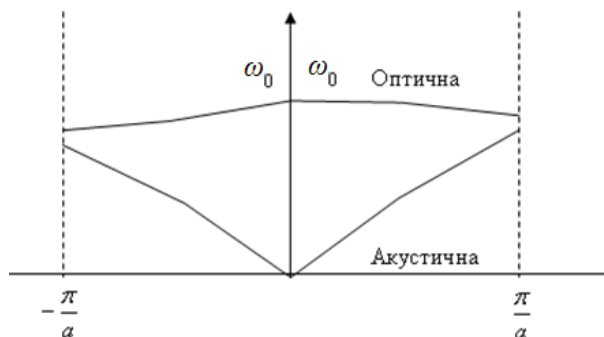


Рис. 173

Відмінність оптичної вітки коливань від акустичної для $q \rightarrow 0$ у оптичній $\omega \rightarrow \omega_0$, а в акустичній для $q \rightarrow 0$ $\omega \rightarrow 0$. Отже, оптична і акустична вітка відрізняються між собою законами дисперсії. Як ми покажемо пізніше, назва акустична вітка коливань пов'язана з тим, що для цих коливань (які описуються акустичним законом) сусідні атоми коливаються в фазах і нагадують поширення звуку, під час якого сусідні атоми також коливаються в фазі. Назва оптична вітка коливань пов'язана з тим, що для коливань цього типу сусідні атоми різного сорту коливаються в протифазі. Під час таких коливань змінюється електричний дипольний момент $\left(\frac{e}{R}\right)$. Під час проходження електромагнітної хвилі через кристал, частота якої близька до частоти оптичних коливань, відбувається явище резонансу, тобто сусідні атоми починають коліватися з частотою, близькою до ω_0 , поглинаючи у цьому випадку частину енергії електромагнітної хвилі. Тоді в спектрі пропускання будуть відсутні частоти близькі до ω_0 . Тому ці коливання називаються *оптичними*.

§153. Нормальні координати для простої одновірної ґратки

У випадку простої одновірної ґратки ми запишемо зміщення

$$u_n = Aq e^{i(qan - \omega t)}. \quad (153.1)$$

Реальне зміщення в простому одновірному кристалі буде представляти собою суперпозицію плоских хвиль типу рівності (153.1). Оскільки в кристалі можуть поширюватися хвилі з різними частотами

$$u_n = \sum_q \{Aq e^{i(qan - \omega t)} + A^* q e^{-i(qan - \omega t)}\}. \quad (153.2)$$

Формула (153.2) дає нам зміщення атома в довільний момент часу. Введемо тепер величини a_q і a_q^* , які визначимо таким співвідношенням:

$$a_q = \sqrt{G} A q e^{-i\omega t}. \quad (153.3)$$

Тоді

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_q \{a_q e^{iqan} + a_q^* e^{-iqan}\}. \quad (153.4)$$

Сума у виразі (153.4) як і в рівнянні (153.2) береться за всіма можливими значеннями q . Бачимо, що зміщення повністю визначається величинами a_q і a_q^* . Можна сказати, що величина a_q і a_q^* повністю визначають мікростан системи. Тому, якщо вони будуть відомі, то будуть відомі положення і швидкість всіх атомів. Знайдемо тепер повну енергію кристалічної ґратки і виразимо її через a_q і a_q^*

$$E = T + \Phi, \quad (153.5)$$

де T - кінетична енергія; Φ - потенціальна енергія.

Запишемо формули розрахунку для кінетичної та потенціальної енергій:

$$T = \frac{m}{2} \sum_n u_n^2; \quad (153.6)$$

$$\Phi = \frac{\beta}{2} \sum_n (u_n - u_{n-1})^2. \quad (153.7)$$

Якщо тепер вирази (153.6) і (153.7) підставити у вираз (153.4), то кінетична енергія набуває вигляду:

$$T = \frac{m}{2} \sum_q \omega_q^2 (2a_q a_q^* - a_q a_{-q} - a_q^* a_{-q}^*), \quad (153.8)$$

а потенціальна енергія набуває такого вигляду:

$$\Phi = \frac{m}{2} \sum_q \omega_q^2 (2a_q a_q^* + a_q a_{-q} + a_q^* a_{-q}^*). \quad (153.9)$$

Тоді повна енергія кристалу:

$$E = T + \Phi = 2m \sum_q \omega_q^2 a_q a_q^*. \quad (153.10)$$

Введемо тепер замість a_q і a_q^* нові величини x_q і p_q , які визначимо таким співвідношенням:

$$\begin{cases} x_q = a_q + a_q^*; \\ p_q = \frac{m\omega_q}{i}(a_q - a_q^*). \end{cases} \quad (153.11)$$

Виразимо з цієї системи a_q і a_q^*

$$\begin{cases} a_q = \frac{1}{2}\left(x_q + \frac{i}{m\omega_q}p_q\right), \\ a_q^* = \frac{1}{2}\left(x_q - \frac{i}{m\omega_q}p_q\right), \end{cases} \quad (153.12)$$

а

$$\omega_q^2 = 4\frac{\beta}{m}\sin^2\frac{qa}{2}.$$

Рівність (153.12) підставимо у вираз (153.10), отримаємо

$$E = 2m \sum_q \omega_q^2 \frac{1}{4} \left(x_q^2 + \frac{p_q^2}{m^2 \omega_q^2} \right) = \sum_q \left(\frac{p_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} x_q^2 \right). \quad (153.13)$$

Вираз (153.13) представляє собою повну енергію кристалу виражену через деякі змінні x_q і p_q . Ці змінні називаються *нормальними координатами* і їх можна розглядати як узагальнені координати й імпульси системи, оскільки вони зв'язані певним чином з координатами атомів та їх швидкостями. Введемо тепер таке позначення:

$$H_q = \frac{p_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} x_q^2, \quad (153.14)$$

тоді повна енергія кристалу запишеться таким чином:

$$E = \sum_q H_q. \quad (153.15)$$

Вираз (153.14) - це функція Гамільтона (тобто повна енергія) деякого абстрактного лінійного гармонічного осцилятора масою m і частотою ω_q . А з виразу (153.15) видно, що в нормальних координатах повна енергія кристалу представляє сукупність енергії G абстрактних лінійних гармонічних осциляторів з різними частотами.

Зауваження: введені нами абстрактні осцилятори незв'язані безпосередньо з конкретним атомом і кожний такий осцилятор являє собою коливання не одного, а всіх атомів кристалічної ґратки.

§154. Коливання тривимірної ґратки

Всі основні результати, які ми отримали для одномірної ґратки

переносяться на випадок тривимірної ґратки.

1. Коли елементарна комірка містить один атом, тобто коли в кристалі всі атоми одного сорту, то в такому кристалі можуть існувати тільки акустичні коливання. Є тільки три акустичні вітки коливань, що відповідають трьом можливим поляризаціям коливань - одна повздовжня і три поперечні.

2. Як і в одномірному випадку значення хвильового вектора можна обмежити в інтервалі

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\pi}{a} \leq q_x \leq \frac{\pi}{a}; \\ -\frac{\pi}{a} \leq q_y \leq \frac{\pi}{a}; \\ -\frac{\pi}{a} \leq q_z \leq \frac{\pi}{a}, \end{aligned} \right\} \quad (154.1)$$

оскільки всі закономірності будуть періодичні з періодом $2\pi a$. Співвідношення (154.1) визначає деяку область в просторі, яку називають *зоною Бріллюена*. Закони дисперсії для акустичних коливань можуть мати такі вигляди як рисунок 174.

3. Як і в одномірному випадку можна ввести нормальні координати, так що енергія кристалу буде представлятись як сума енергій $3n$ абстрактних лінійних гармонічних осциляторів з різними частотами і поляризаціями (рис. 175).

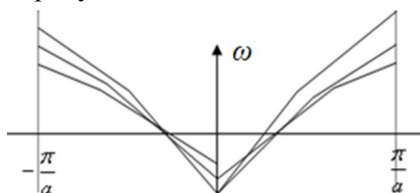


Рис. 174

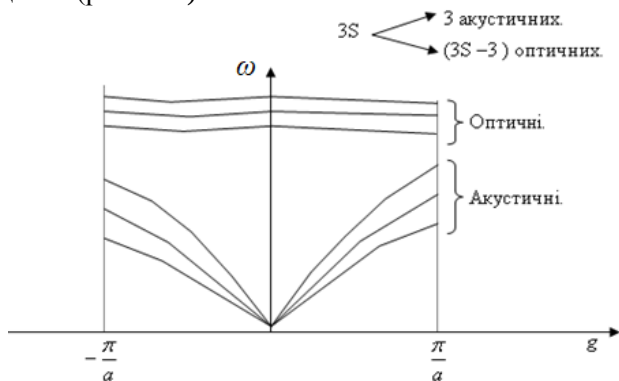


Рис. 175

4. Якщо кристал складається з атомів різного сорту або взагалі кажучи, коли в елементарній комірці більше одного атома, то в такій складній ґратці існують як акустичні так і оптичні коливання. Причому, якщо в елементарній комірці є S атомів, то всього буде $3S$ віток коливань. Із них 3 акустичних і $3S - 3$ оптичних. Взагалі кажучи для всіх віток залежність $\omega(q)$ може бути різною.

5. Для складної тривимірної ґратки як і для простої можна ввести нормальні координати, в яких повна енергія кристалу запишеться у вигляді суми $3nS$ енергій деяких абстрактних лінійних гармонічних осциляторів. Ось така описова картина коливань атомів в тривимірній кристалічній ґратці.

ЛЕКЦІЯ 44. МЕТОД КВАЗІЧАСТИНОК

§155. Фонони.

§156. Дисперсія фононів і її дослідження за допомогою розсіювання нейтронів.

§157. Електрон-фононна взаємодія.

[2. §10; 4. §1.1-§1.6; 5. §6.4-§6.6]

§155. Фонони

Ми з'ясували, що в нормальних координатах енергія коливань кристалічної ґратки представлена у вигляді суми функцій Гамільтона деяких гармонічних осциляторів

$$E = \sum_{qj} H_{qj}, \quad (155.1)$$

де

$$H_{qj} = \frac{p_{qj}^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} x_{qj}^2. \quad (155.2)$$

Причому сума береться за різними всіма можливими значеннями хвильового вектора і різних поляризаціях, що відповідають різним віткам коливань. Причому, якщо в кристалі є N атомів, то коливанням цих атомів можна співставити $3NS$ абстрактних лінійних гармонічних осциляторів і тоді m в формулі (155.2) буде представляти масу елементарної комірки.

Зауважимо ще раз, що нормальні координати x_q і p_q не відносяться безпосередньо до коливань окремого атома, а

характеризують коливання всіх атомів кристалічної ґратки в цілому.

Перейдемо тепер у виразах (155.1) і (155.2) до квантово-механічного опису коливань. Інакше кажучи, проквантуємо коливання нормальних осциляторів. Для цього співвідношення (155.1) запишемо через оператор Гамільтона H

$$\hat{H} = \sum_{qj} \left[\frac{\hat{p}_{qj}^2}{2M} + M\omega_q^2 \hat{x}_{qj}^2 \right], \quad (155.3)$$

а оператори координат і імпульсів

$$\left. \begin{aligned} \hat{x}_{qj} &= \hat{x}_{qj} a, \\ \hat{p}_{qj} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{qj}}. \end{aligned} \right\} \quad (155.4)$$

Щоб знайти енергію кристалічної ґратки, треба розв'язати рівняння Шредінґера з оператором Гамільтона (155.3)

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \quad (155.5)$$

$$\hat{H} = \sum_{qj} \hat{H}_{qj}, \quad (155.6)$$

$$\hat{H}_{qj} = \frac{\hat{p}_{qj}^2}{2M} + \frac{M\omega_q^2}{2} x_{qj}^2. \quad (155.7)$$

Як слідує з квантової механіки, що оператор Гамільтона системи представлений у вигляді суми операторів Гамільтона підсистем. В нашому випадку окремих осциляторів розв'язок рівняння Шредінґера для квантової системи представлений у вигляді добутку хвильових функцій окремих осциляторів. А енергія кристалу буде виражатися як сума енергій окремих осциляторів.

Запишемо тепер рівняння Шредінґера для окремих осциляторів

$$\hat{H}_{jq}\Psi_{nj} = E_{nj}\Psi_{nj}. \quad (155.8)$$

Як слідує з квантової механіки власні значення енергії E_n лінійного гармонічного осцилятора квантуються

$$E_n = \hbar\omega_{qj} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (155.9)$$

де n -квантове число осцилятора ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Отже, енергія абстрактного лінійного гармонічного осцилятора квантуються, причому величина кванта енергії $\hbar\omega_{qj}$. Тобто вона різна для різних хвильових векторів $\vec{q}$ і різних поляризацій $\vec{j}$. Отже, енергію кристалу, атоми якого коливаються, можна представити у вигляді сукупності квантів. Енергія кожного з яких $\hbar\omega_{qj}$.

Розглянемо тепер взаємодію носіїв зарядів (електронів або

дірок) з коливаннями кристалічної ґратки. Виявляється, що ця взаємодія полягає в тому, що енергія електрона $E(\vec{p})$ та його квазіімпульс $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ змінюються завжди так, що енергія завжди міняється на величину кванта осцилятора, причому виконується закон збереження енергії, а саме:

$$\mathcal{E}(\vec{p}) = \mathcal{E}(\vec{p}') \pm \hbar\omega_{qj}, \quad (155.10)$$

де $\mathcal{E}(p)$, $\mathcal{E}(p')$ - енергії електрона до та після взаємодії.

А квазіімпульс такої системи змінюється теж з виконанням закону збереження квазіімпульсу

$$\vec{p} = \vec{p}' \pm \hbar\vec{q}, \quad (155.11)$$

де p - квазіімпульс до взаємодії; p' - квазіімпульс після взаємодії.

Таким чином, на основі рівнянь (155.10) і (155.11) можна описати взаємодію частинки з ґраткою. Цю взаємодію можна практикувати як зіткнення електрона з деякою частинкою, яка має енергію $E = \hbar\omega_{qj}$ і квазіімпульс $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Ось ці частинки, про зіткнення з якими йде мова і які відповідають коливанням кристалічної ґратки і називаються *фононами*. Отже, кристал, атоми якого коливаються навколо рівноважних положень можна представити у вигляді газу фононів. Тоді цей газ є бозонним газом. Оскільки спин фонона дорівнює нулю - хімічний потенціал теж дорівнює нулю. Строго кажучи фонони не являються частинками в загальноприйнятому розумінні цього слова. Оскільки їх число залежить від температури. Тому їх називають *квазістатичними*.

Розглянемо абстрактний осцилятор з частотою ω_{qj} , поляризацією j і хвильовим вектором $\vec{q}$. Отже, *фонони* - це квазічастинки, які співставляються абстрактним осциляторам, а не конкретним атомам. Тобто, кожен фонон в кристалі пов'язаний з коливаннями не одного атома, а всієї кристалічної ґратки. Таким чином, можна сказати, що фонони - це квазічастинки, що відповідають пружним коливанням кристалічної ґратки і є квантами коливань кристалічної ґратки, яким можна приписати енергію $\hbar\omega$ і імпульс $\hbar\vec{q}$. Експериментально наявність в кристалі фононів була підтверджена під час вивчення взаємодії потоку нейтронів з кристалом.

§156. Дисперсія фононів і її дослідження за допомогою розсіювання нейтронів

Дисперсія фононів визначається залежністю ω_S від хвильового

вектора $\vec{q}$ і вона є періодичною функцією від $\vec{q}$:

$$\omega_s(\vec{q} + \vec{g}) = \omega_s(\vec{q}), \quad (156.1)$$

де $\vec{g}$ - вектор зворотної ґратки.

Так як для $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{g}$ коефіцієнти, що визначають значення величини $\omega_s(\vec{q})$ не змінюються, то виконується умова виразу (156.1). Звідси слідує, що для кожної вітки коливань достатньо розглянути значення $\vec{q}$ з першої зони Бріллюена. З рівності (156.1) слідує, що $\hbar\omega_s(\vec{q})$ приймає значення, які утворюють енергетичну зону фононів. На рисунку 176 схематично показана періодична залежність $\omega_s(\vec{q})$ для лінійної ґратки з однакових атомів. У тривимірному випадку залежність $\omega_s(\vec{q})$ зображується поверхнею. На рисунку 177 схематично показано переріз поверхонь постійної частоти площиною рисунка. Для заданного напрямку $\vec{q}$ частота ω_s є функцією величини q .

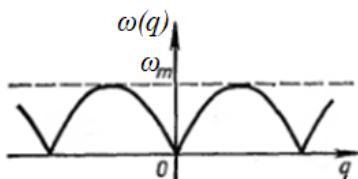


Рис. 176

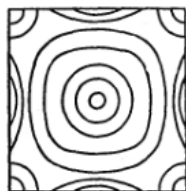


Рис. 177

На рисунку 178 схематично показана залежність $\omega_s(\vec{q})$ в напрямку $[210]$ для ґранецентрованих кубічних ґраток. На рисунку 179 схематично показані поздовжні (L) і поперечні (T) вітки акустичних і оптичних коливань у напрямку $[111]$ для ґратки, утвореної двома ґранецентрованими кубічними ґратками, зсунутими одна від одної на вектор $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$.

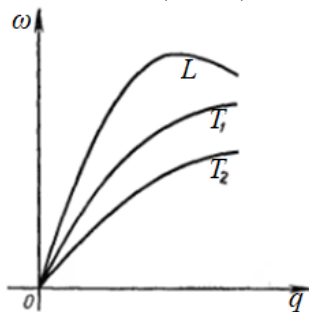


Рис. 178

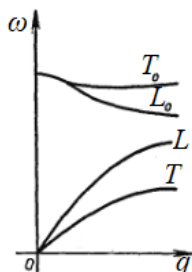


Рис. 179

Закон дисперсії фонові може бути визначений експериментально шляхом вивчення непружного розсіювання частинок, пов'язаного з випромінюванням або поглинанням фону. Якщо $\mathcal{E}(\vec{k}_a)$ - початкова енергія частинки, а $\mathcal{E}(\vec{k}_b)$ її кінцева енергія, то відповідно закону збереження енергії

$$\mathcal{E}(\vec{k}_b) = \mathcal{E}(\vec{k}_a) \pm \hbar\omega_s(\vec{q}). \quad (156.2)$$

Вважаючи, що початковий імпульс частинки $\hbar\vec{k}_a$ і її кінцевий імпульс $\hbar\vec{k}_b$, то можна записати:

$$\hbar\vec{k}_b = \hbar\vec{k}_a \pm \hbar\vec{q} + \hbar\vec{g}. \quad (156.3)$$

Враховуючи вирази (156.1) та вирази (156.2), (156.3) можна записати:

$$\hbar\omega_s(\vec{k}_b - \vec{k}_a - \vec{g}) = \pm[\mathcal{E}(\vec{k}_b) - \mathcal{E}(\vec{k}_a)]. \quad (156.4)$$

Так як, відповідно до формули (156.1)

$$\omega_s(\vec{k} - \vec{g}) = \omega_s(\vec{k}),$$

то із рівності (156.4), маємо:

$$\omega_s(\vec{k}_b - \vec{k}_a) = \pm \frac{1}{\hbar} [\mathcal{E}(\vec{k}_b) - \mathcal{E}(\vec{k}_a)]. \quad (156.5)$$

Підставляючи у формулу (156.5) експериментально визначені значення зміни енергії частинки $\mathcal{E}(\vec{k}_b) - \mathcal{E}(\vec{k}_a)$ і зміну її імпульсу $\hbar(\vec{k}_b - \vec{k}_a)$, можна знайти закон дисперсії фонові. Найбільш ефективним для цього є непружне розсіювання повільних нейтронів. Це зумовлено тим, що у випадку інших частинок енергії або імпульси не співпадають за порядком величини з енергією й імпульсом фону. У випадку повільних нейтронів з енергією порядку $10^{-3} - 10^{-1}$ еВ імпульс нейтрона має порядок величиною $10^{-19} - 10^{-18} \frac{\text{г}\cdot\text{см}}{\text{с}}$,

що порівняно з імпульсом фону $\hbar q \sim 10^{-19} \frac{\text{г}\cdot\text{см}}{\text{с}}$ для $q = \frac{2\pi}{a}$. Збіг порядків величин енергій та імпульсів повільних нейтронів і фонові дає можливість отримати на основі (156.5) найбільш точні експериментальні криві, що описують закон дисперсії фонові. На рисунку 180 показані експериментальні дані, отримані методом непружного розсіювання нейтронів для Na (світлі точки - для поперечних коливань, чорні - для поздовжніх.

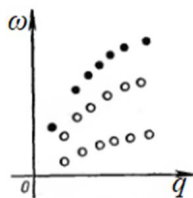


Рис. 180

§157. Електрон-фоонна взаємодія

Електрон-фоонна взаємодія - взаємодія між електронними

станами твердого тіла й коливаннями кристалічної ґратки. Зонна теорія електронних станів у твердому тілі базується на адіабатичному наближенні.

Коливання іонів біля вузлів кристалічної ґратки призводять до зміни $\Delta V(\vec{r})$ потенціалу ґратки $V(\vec{r})$ і, відповідно, до збудження руху електронів. Енергія W взаємодії електронів із зміною потенціалу має вигляд:

$$W = \int_{\vec{r}} \rho(\vec{r}) \Delta V(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (157.1)$$

де

$$\rho(\vec{r}) = e\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (157.2)$$

є густина заряду електрона.

Хвильова функція електрона з невизначеним імпульсом має вигляд:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (157.3)$$

де $\frac{1}{\sqrt{\Omega}}$ - множник, що забезпечує нормування хвильової функції електрона за об'ємом Ω . Із виразу (157.2) та (157.3) маємо:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{e}{\Omega} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}_1}^* c_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}}. \quad (157.4)$$

Вважаючи, що періодичний потенціал ґратки має вигляд

$$V(\vec{r}) = \sum_n v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) \quad (157.5)$$

де $v_I(\vec{r} - \vec{l}_n)$ - потенціал іона вузла l_n .

Отримаємо, що

$$\begin{aligned} \Delta V(\vec{r}) &= \sum_n v_I(\vec{r} - \vec{l}_n - \vec{r}_n) - \sum_n v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) = \\ &= - \sum_n \vec{r}_n \text{grad} v_I(\vec{r} - \vec{l}_n), \end{aligned} \quad (157.6),$$

де $\vec{r}_n$ - зміщення n -го іона.

Із виразів (157.1), (157.4) і (157.6), отримаємо

$$W = -\frac{e}{\Omega} \sum_n \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}} \vec{r}_n \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} \text{grad} v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) d\vec{r} c_{\vec{k}_1}^* c_{\vec{k}}. \quad (157.7)$$

Для подальшого дослідження скористаємося формулою:

$$r_{m\beta} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) B_s(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{l}_m}, \quad (157.8)$$

де N - число елементарних комірок; M - маса атома кристалу.

Підставимо значення $\vec{r}_n$ із формули (157.8) в формулу (157.7), отримаємо

$$W = -\frac{e}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 \sum_n e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{l}_n} \times \\ \times \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} \text{grad} v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) d\vec{r} c_{\vec{k}_1}^* c_{\vec{k}} B_s(\vec{q}). \quad (157.9)$$

Перехід до фононів здійснюється шляхом заміни амплітуд $B_s(\vec{q})$ нормальних коливань ґратки на оператори вторинного квантування $a_{\vec{q}s}$. Аналогічну заміну необхідно зробити також для амплітуд $c_{\vec{k}}$ розкладання виразу (157.3) хвильової функції електрона. Відповідні оператори вторинного квантування задовольняють перестановочним співвідношенням

$$[c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}_1\sigma_1}^+]_+ = \delta_{\vec{k}\vec{k}_1} \delta_{\sigma\sigma_1}, \quad (157.10)$$

$$[c_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}_1\sigma_1}^+]_+ = [c_{\vec{k}\sigma}^+ c_{\vec{k}_1\sigma_1}^+]_+ = 0, \quad (157.11)$$

де σ - проекція спіна.

Співвідношення (157.10) враховує принцип Паулі. Замінюючи у співвідношенні (157.9) амплітуди $B_s(\vec{q})$ і $c_{\vec{k}}$ на відповідні оператори вторинного квантування, отримаємо гамільтоніан електрон-фотонної взаємодії:

$$H_{\text{еф}} = \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 D_s(\vec{q}, \vec{k} - \vec{k}_1) c_{\vec{k}_1\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} (a_{\vec{q}s} - a_{-\vec{q}s}^+), \quad (157.12)$$

де

$$D_s(\vec{q}, \vec{k} - \vec{k}_1) = -\frac{e}{\Omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_s(\vec{q})}} \vec{e}^{(s)}(\vec{q}) \times \\ \times \sum_n e^{i\vec{q}\vec{l}_n} \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} \text{grad} v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) d\vec{r}. \quad (157.13)$$

Помноживши і поділивши підінтегральний вираз із (157.13) на $e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{l}_n}$, маємо:

$$D_s(\vec{q}, \vec{k} - \vec{k}_1) = -\frac{e}{\Omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_s(\vec{q})}} \vec{e}^{(s)}(\vec{q}) \times \\ \times \sum_n e^{i(\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{l}_n} \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)(\vec{r}-\vec{l}_n)} \text{grad} v_I(\vec{r} - \vec{l}_n) d\vec{r}. \quad (157.14)$$

Інтеграл із виразу (157.14) не залежить від положення n -го вузла ґратки. У цьому випадку, враховуючи, що

$$\sum_n e^{i\vec{l}_n(\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}_1)} = N\delta(\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}_1 + \vec{g}), \quad (157.15)$$

отримаємо для N -процесів ($\vec{g} = 0$) із виразів (157.12) і (157.14)

$$H_{\text{еф}} = \sum_k \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 D_s(\vec{q}) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} (a_{\vec{q}s} - a_{-\vec{q}s}^+), \quad (157.16)$$

де

$$D_s(\vec{q}) = -\frac{Ne}{\Omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_s(\vec{q})}} \vec{e}^{(s)}(\vec{q}) \int_{\vec{r}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \text{grad} v_I(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (157.17)$$

Із виразу (157.16) видно, що електрон-фононна взаємодія призводить до процесів поглинання ($a_{\vec{q}s}$) або випромінювання ($a_{-\vec{q}s}^+$) фонона під час переходу електрона із стану $|\vec{k}\sigma\rangle$ в стан $|\vec{k} + \vec{q}, \sigma\rangle$ (рис. 181)

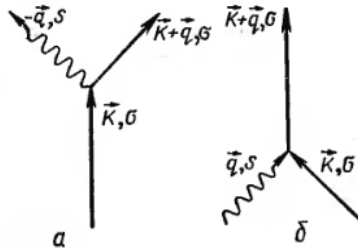


Рис. 181

Виконуючи інтегрування за частинами та роблячи декі підстановки, отримаємо:

$$D_s(\vec{q}) = ie \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_s(\vec{q})}} \vec{q} \vec{e}^{(s)}(\vec{q}) v_l(\vec{q}). \quad (157.18)$$

Якщо коливання ґратки можуть бути розділені на поздовжні і поперечні, то скалярний добуток $\vec{q} \vec{e}^{(s)}(\vec{q})$ відмінний від нуля і дорівнює q тільки для поздовжніх фононів. Тоді з виразів (157.16) і (157.18), маємо

$$H_{\text{еф}} = ie \sqrt{\frac{\hbar}{2NM}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{q}} \frac{q v_l(\vec{q})}{\sqrt{\omega(\vec{q})}} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} (a_{\vec{q}} - a_{-\vec{q}}^+). \quad (157.19)$$

Гамільтоніан (157.19) отриманий у наближенні «жорстких іонів», оскільки в (157.6) передбачається, що електричне поле жорстко зв'язане з іоном і рухається разом з ним. Застосовуються також й інші наближення (модель деформованих іонів, наближення потенціалу деформації тощо). Однак у всіх моделях загальна структура гамільтоніана (157.16) зберігається:

$$H_{\text{еф}} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}_1, \sigma, s} M_{\vec{k}, \vec{k}_1, s} c_{\vec{k}_1, \sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} (a_{\vec{k}_1 - \vec{k}, s} - a_{\vec{k}_1 - \vec{k}, s}^+). \quad (157.20)$$

Різні моделі відрізняються одні від одних значенням матричного елемента $M_{\vec{k}, \vec{k}_1, s}$.

Лекція 45. ТЕПЛОЄМНІСТЬ ТВЕРДИХ ТІЛ ДЛЯ ВИСОКИХ І НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР

§158. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Ейнштейном).

§159. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Дебаєм).
[2. §11, §12]

§156. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Ейнштейном)

З курсу загальної фізики відомо, що для кристалів класична фізика дає значення молярної теплоємності

$$C_V = 3N_A k = 3R.$$

Якщо виразити у числовому значенні, то $C_V \approx 6 \frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Цей результат в класичній теорії називається *законом Дюлонга*

і *Пті*. Експериментально цей закон підтверджується тільки для високих температур. За низьких температур теплоємність кристалу істотним чином залежить від температури. Тоді $C_V \rightarrow 0$, якщо $T \rightarrow 0$ (згідно терми Нернста).

Обчислимо тепер теплоємність кристалу з врахуванням квантових закономірностей. Якщо в кристалі є N атомів, то розглянемо коливання кожного атома як сукупність трьох лінійних гармонічних осциляторів. Тоді внутрішня енергія кристалу

$$U = 3N\bar{\mathcal{E}}_{\text{осц}}. \quad (158.1)$$

Зауваження: якщо цей вираз підставити в класичне значення енергії осцилятора, то отримаємо закон Дюлонга Пті

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{осц}}^{\text{клас}} = kT, \quad (158.2)$$

$$U = 3NkT, \quad (158.3)$$

$$C_V^{\text{клас}} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3N_A k = 3R. \quad (158.4)$$

Вираз (158.4) виражає закон Дюлонга Пті. Як ми покажемо пізніше, що середня енергія квантового лінійного гармонічного осцилятора визначається виразом:

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{осц}}^{\text{КВ}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (158.5)$$

Ейнштейн припустив, що всі осцилятори, які ми співставляємо атомам коливаються з однієї частотою, яка потім підбиралась так, щоб добитися найкращого співпадання теорії з експериментом. Розрахуємо тепер внутрішню енергію кристалу підставляючи вираз (158.5) у вираз (158.1) і продиференціювавши за T знайдемо теплоємність такого кристалу

$$U = \frac{3}{2}N\hbar\omega + \frac{3N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (158.6)$$

Тоді знайдемо теплоємність C_V :

$$\begin{aligned} C_V &= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3N\hbar\omega \frac{(-1)e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^2} \left(-\frac{\hbar\omega}{kT^2}\right) = \\ &= \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 3Nk. \end{aligned} \quad (158.7)$$

Розглянемо тепер два випадки:

1. У випадку високих температур

$$\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1 \text{ (класична границя),} \quad e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT},$$

$$C_V = \frac{1}{\left(1 + \frac{\hbar\omega}{kT} - 1\right)^2} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 3Nk. \quad (158.8)$$

Рівність (158.8) дає нам закон *Дюлонга-Пті*.

2. За низьких температур

$$\frac{\hbar\omega}{kT} \gg 1,$$

$$C_V \approx 3Nk \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}. \quad (158.9)$$

Для $T \rightarrow 0$ $C_V \rightarrow 0$ за експоненціальним законом. Зобразимо експериментальну і теоретичну залежність (рис. 182).

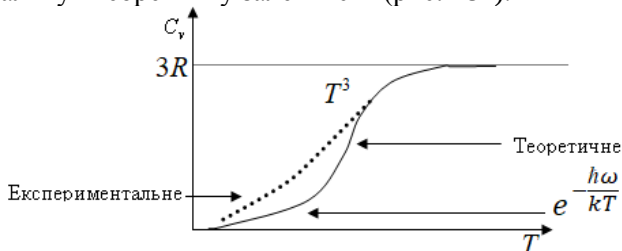


Рис. 182

Висновок. Базуючись на квантовому представленні теорії Ейнштейна було правильно висвітлено основні моменти в поведінці теплоємності. А саме, для високих температур теплоємність описується формулою Дюлонга-Пті, а для низьких, вона прямує до нуля ($T \rightarrow 0$).

Строгого співпадання з експериментом за законом T^3 отримано не було. Для отримання точного співвідношення необхідно було більш точну, більш деталізовану модель. Оскільки припущення про те, що всі атоми коливаються з однією і тією ж частотою виявилися недостатньо точними. Вся ця деталізація зроблена Дебаєм.

§159. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Дебаєм)

Більш точна теорія порівняно з ейнштейнівською була створена

Дебаєм в 1912 році. Дебай на відміну від Ейнштейна розглядав кристал як коливний континуум (середовище, в якому є всі можливі частоти). Тоді коливання атомів в кристалі представляються як коливання в континуумі. *Коливний континуум* можна представити собі як сукупність лінійних гармонічних осциляторів з різними частотами. На відміну від Ейнштейна в Дебая вважається, що осцилятори коливаються не з однією частотою, а з різними частотами як це має місце в коливному континуумі. Крім того Дебай врахував дискретну структуру кристалу, обмеживши всі можливі частоти коливань зверху. Тобто він розглядав частоти від 0 до $\omega_{\max}$.

Як ми покажемо, що максимальна частота в теорії Дебая відповідає таким довжинам хвиль, які порядку подвоєної атомної віддалі $2a$. Для розрахунку повної енергії кристалу спочатку знайдемо число осциляторів, частоти яких лежать в інтервалі від ω до $\omega + d\omega$. Помноживши це число на енергію кожного осцилятора від $[\omega, \omega + d\omega]$ та проінтегрувавши отриманий вираз за всіма можливими частотами від 0 до $\omega_{\max}$ знайдемо внутрішню енергію кристалу, що зв'язана з коливаннями атомів. Продиференціювавши отриманий вираз за температурою, отримаємо теплоємність.

Можна показати, що число осциляторів в частотному інтервалі $[\omega, \omega + d\omega]$ описується таким виразом:

$$dN(\omega) = \frac{3V\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \bar{v}^3}, \quad (159.1)$$

де V - об'єм основної області кристалу; $\bar{v}$ - швидкість поширення звуку в кристалі.

Тоді енергія, яка припадає на цей частотний інтервал розраховується так:

$$dU(\omega) = dN(\omega) \bar{\epsilon}_{\text{осц}}. \quad (159.2)$$

Середня енергія осцилятора має такий вигляд:

$$\bar{\epsilon}_{\text{осц}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (159.3)$$

Вираз (159.3) підставимо у рівність (159.2), отримаємо:

$$dU(\omega) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right) \frac{3V\hbar\omega^3 d\omega}{2\pi^2 \bar{v}^3}. \quad (159.4)$$

Знайдемо тепер повну енергію коливань. Для цього проінтегруємо вираз (159.4) в межах

$$0 \leq \omega \leq \omega_{\max}. \quad (159.5)$$

Обмеженість частот певним чином враховує дискретні частоти кристалу. Отже,

$$\begin{aligned} U(\omega_{\max}) &= \int_0^{\omega_{\max}} dU(\omega) = \frac{3V\hbar}{2\pi^2\bar{v}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\ &= \frac{3V\omega_{\max}^4\hbar}{2 \cdot 8\pi^2\bar{v}^3} + \frac{3V\hbar}{2\hbar^2\bar{v}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = U_0 + U_1(T). \end{aligned} \quad (159.6)$$

Частота $\omega_{\max}$ у виразі (159.5) визначалась з такої умови:

$$\int_0^{\omega_{\max}} dN(\omega) = 3N. \quad (159.7)$$

Підставимо у вираз (159.1) $dN(\omega)$ і знайдемо $\omega_{\max}$

$$\frac{3V}{2\hbar^2\bar{v}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^2 d\omega = \frac{V\omega_{\max}^3}{2\hbar^2\bar{v}^3}. \quad (159.8)$$

З рівняння (159.8)

$$\omega_{\max} = \left(\frac{6\pi^2\bar{v}^3 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (159.9)$$

Пізніше ми обчислимо цю частоту і покажемо, яким чином враховується дискретність структури кристалу.

Зробимо тепер в інтегралах рівності (159.6) заміну змінних:

$$\frac{\hbar\omega}{\theta} = x.$$

Тоді $U_1(T)$ буде мати такий вигляд:

$$U_1(T) = \frac{3V\hbar}{2\hbar^2\bar{v}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - 1} = \frac{3V\hbar}{2\pi^2\bar{v}^3} \left(\frac{\theta}{\hbar} \right)^4 \int_0^{\frac{\theta}{\hbar}\omega_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (159.10)$$

Введемо тепер так звану температуру Дебая за допомогою співвідношення:

$$T_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k}.$$

Тоді верхня границя в інтегралі виразу (159.10) заміниться на відношення:

$$\omega_{\max} \rightarrow \frac{T_D}{T}.$$

Отже, вираз (159.10) набуває такого вигляду:

$$U_1(T) = \frac{3V\theta^4}{2\pi^2\bar{v}^3\hbar^3} \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (159.11)$$

Інтеграл у рівнянні (159.11) набуває вигляду, який в елементарних функціях не береться. Тому зручно вираз (159.11) переписати дещо в іншому вигляді і ввести так звану функцію Дебая

$$U_1(T) = \frac{3VkTk^3T^3}{2\pi^2\bar{v}^3\hbar^3\omega_{\max}^3} - \omega_{\max}^3 \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{3VkT}{2\pi^2\bar{v}^3} \omega_{\max}^3 \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (159.12)$$

де $\frac{k^3T^3}{\hbar^3\omega_{\max}^3} = T_D$ - температура Дебая.

Функція Дебая має вигляд:

$$D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (159.13)$$

Тоді $U_1(T)$ може бути записане у такому вигляді:

$$U_1(T) = \frac{VkT}{2\pi^2\bar{v}^3} \omega_{\max}^3 D\left(\frac{T_D}{T}\right). \quad (159.14)$$

Виходячи із рівнянь (159.14) і (159.6), тепер отримаємо вираз для теплоємності

$$C_V = \left(\frac{\partial U_1}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial U_1}{\partial T}\right)_V = \frac{VkT\omega_{\max}^3}{2\pi^2\bar{v}^3} D\left(\frac{T_D}{T}\right) + \frac{VkT\omega_{\max}^3}{2\pi^2\bar{v}^3} \frac{\partial D\left(\frac{T_D}{T}\right)}{\partial T} \left(\frac{T_D}{T}\right). \quad (159.15)$$

Так як U_0 вклад у теплоємність давати не буде, то беремо похідну лише від $U_1(T)$.

Покажемо тепер, що з виразу (159.6) для внутрішньої енергії і виразу (159.14) можна отримати, як класичний випадок, закон Дюлонга-Пті, так і вираз для теплоємності за значного впливу квантових властивостей в системі.

1. Розглянемо випадок високих температур

$$\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$$

або коли

$$\frac{T_D}{T} \leq 1.$$

В цьому випадку у виразі (159.13) будуть відігравати основну роль малі значення аргумента. Коли в інтегралі виразу (159.13) $e^x \approx 1 + x$, тоді

$$U_1(T) = \frac{VkT}{2\pi^2\bar{v}^3} \frac{6\pi^2\bar{v}^3 N}{V} D(z), \quad (159.16)$$

де

$$D(z)|_{z \ll 1} = \frac{3}{z^3} \int_0^z x^2 dx = 1.$$

Для $U_1(T)$ знаходимо:

$$U_1(T) = 3NkT. \quad (159.17)$$

Таким чином,

$$C_V = 3N_A k = 3R. \quad (159.18)$$

Рівність (159.18) - закон Дюлонга і Пті.

2. Розглянемо другий граничний випадок – за низьких температур.

$$\frac{T_D}{T} \gg 1.$$

У цьому випадку в функції Дебая верхню границю інтегрування можна замінити на нескінченність. Тоді

$$D(z) = 3 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (159.19)$$

Цей інтеграл виразу (159.19) дорівнює $\frac{\pi^4}{15}$. Отже,

$$U_1(T) = 3NkT \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \frac{\pi^4}{15} \cdot 3. \quad (159.20)$$

За низьких температур $C_V \sim T^3$. Отже, для $T \rightarrow 0$, $C_V \rightarrow 0$ за законом T^3 . Таким чином, теорія Дебая правильно передбачила поведінку теплоємності у всьому температурному інтервалі і добре узгоджуються з експериментом. З'ясуємо тепер фізичний зміст $\omega_{\max}$

$$\omega_{\max} = \left(\frac{6\pi^2\bar{v}^3 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Об'єм V можна представити у вигляді:

$$V = Na^3, \quad (159.21)$$

де a - стала кристалічної ґратки. Тоді

$$\omega_{\max} = \frac{\bar{v}}{a} (6\pi^2)^{\frac{1}{3}}. \quad (159.22)$$

Розрахуємо тепер мінімальну довжину хвилі, яка відповідає максимальній частоті

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\bar{v}}{\omega_{\max}} = \frac{2\pi\bar{v}a}{\bar{v}(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}} = a \left(\frac{4}{3}\pi\right)^{\frac{1}{3}} \approx 1,62a. \quad (159.23)$$

Висновок. З попереднього матеріалу нам відомо, що мінімальна довжина хвилі, може поширюватися в кристалі з атомною віддаллю a рівна $\lambda_{\min} = 2a$. З виразу (159.23) слідує, що $\lambda_{\min}$, яка може поширюватися в кристалі відповідає $\omega_{\max}$, теж близька до $2a$. Таким чином, обмеження на частоту зроблене Дебаєм певним чином дійсно враховувало дискретну структуру кристалу.

Висновок. Квантова теорія теплоємності за Дебаєм, в якій було враховано весь спектр можливих частот атомів в кристалі та дискретну структуру кристалу вірно пояснила правильні результати у всьому температурному діапазоні.

Зауваження 1: під час розрахунку теплоємності кристалів ми враховували тільки вклад в теплоємність, який дають іони, тобто кристалічна ґратка. Оскільки електронний газ в металі сильно вироджений (описуються статистикою Фермі-Дірака), то електрони в металі вклад практично не дають. (Дивись статистичну фізику, розподіл Фермі-Дірака).

Зауваження 2: під час розгляду інших теплових властивостей кристалу, наприклад, теплопровідність, з'ясовано, що коливання атомів кристалічної ґратки теж будуть відігравати основну роль, а вклад електронів буде дуже малий за тієї ж причини. Але під час розгляду теплопровідності існує одна суттєва відмінність. Явище теплопровідності можна пояснити лише врахувавши відхилення коливань атомів від гармонічного наближення, тобто врахувавши так званий ангармонізм.

Лекція 46. МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ РЕЧОВИНИ

§160. Магнітні характеристики середовища.

§161. Діамагнетики.

§162. Діамагнетизм Ландау.

§163. Парамагнетизм іонів, атомів і молекул.

- §164. Спіновий парамагнетизм Паулі.
 §165. Феромагнетизм.
 §166. Обмінна природа феромагнетизму.
 [2. §13-§15; 4. §12-§14; 5. §5.1-§5.3]

§160. Магнітні характеристики середовища

За всіма магнітними властивостями всі речовини можна поділити на сильномагнітні і слабомагнітні.

До слабомагнітних належать діамагнетики і парамагнетики, до сильномагнітних - феромагнетики, антиферомагнетики.

Пара- і діамагнетики називаються речовини, які у відсутності магнітного поля завжди не намагнічені і які характеризуються однозначною залежністю між вектором намагнічування $\vec{J}$ і напруженістю $\vec{H}$ зовнішнього стаціонарного магнітного поля. Наприклад, у слабких магнітних полях ця залежність має вигляд:

$$\vec{J} = \chi \vec{H},$$

де χ (читається як «хі») - магнітна сприйнятливість речовини.

Разом з тим для парамагнетиків $\chi > 0$, тобто вони намагнічуються в напрямку магнітного поля, для діамагнетиків $\chi < 0$, вони намагнічуються в протилежному напрямку до поля (виштовхуються з поля).

Нагадаємо тепер магнітні характеристики середовища. Помістимо в однорідне магнітне поле з напруженістю $\vec{H}$ і магнітною індукцією

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$$

ізотропне тіло об'ємом V . Під дією цього поля тіло буде намагнічуватись, набуваючи магнітного моменту $\vec{p}_m$. Магнітний момент взагалі кажучи, характеризує обертальний момент $\vec{M}$, який буде діяти на магнітне тіло в зовнішньому магнітному полі. Наприклад, для витка зі струмом обертальний момент:

$$\vec{M} = [\vec{p}_m \times \vec{B}].$$

Причому

$$\vec{p}_m = IS\vec{n},$$

де S - площа контура обмежена витком з струмом; $\vec{n}$ - одиничний нормальний вектор до площини.

Отже, модуль обертального моменту:

$$M = ISB.$$

Відношення магнітного моменту $\vec{p}_m$ до об'єму тіла називається *намагніченістю тіла (вектор намагнічення)*

$$\vec{J} = \frac{\vec{p}_m}{V}. \quad (160.1)$$

Намагніченість є величина векторна і в ізотропних магнетиках може бути направлена паралельно або антипаралельно до $\vec{p}_m$.
Одиниці вимірювання:

$$[p_m] = A \cdot m^2,$$

$$[J] = \frac{A}{m}.$$

За означенням, відношення намагніченості до напруженості магнітного поля називається *магнітною сприйнятливістю*

$$\chi = \frac{J}{H}.$$

Іноколи замість сприйнятливості χ вводять величину *магнітна проникливість* μ . З'ясуємо зв'язок між ними. Намагнічене тіло, що знаходиться в зовнішньому полі створює власне поле:

$$\vec{B}_i = \mu_0 \vec{J} = \mu_0 \chi \vec{H}; \quad (160.2)$$

$$\vec{B}_i = \chi \vec{B}_0. \quad (160.3)$$

Результуюче поле в магнетикі це є сума полів зовнішнього і внутрішнього:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_i = \vec{B}_0 + \chi \vec{B}_0 = (1 + \chi) \vec{B}_0. \quad (160.4)$$

Величину

$$\mu = 1 + \chi \quad (160.5)$$

називають *магнітною проникливістю*.

§161. Діамагнетики

У діамагнетичних тіл магнітна сприйнятливість $|\chi| < 1$, вона від'ємна і не залежить від напруженості зовнішнього поля та температури. Такі тіла намагнічуються в напрямку протилежному до напрямку зовнішнього магнітного поля. Внаслідок чого вони будуть виштовхуватись із областей з більш сильним магнітним полем. Діамагнетизм спостерігається у таких речовин, атоми в яких за відсутності зовнішнього магнітного поля не мають магнітного моменту.

Пояснимо як в атомі може виникнути магнітний момент. У найпростішій Борівській моделі атома електрон з зарядом $(-e)$ обертається навколо ядра по колу створюючи тим самим струм

$$I = -\frac{e}{T},$$

де T - період обертання електрона. Причому

$$T = \frac{2\pi r}{v}.$$

Цей струм призводить до появи магнітного поля. Тому в електрона, що обертається навколо атома є не тільки орбітальний момент кількості руху $L = mvr$, а й орбітальний магнітний момент

$$p_m = IS = -\frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = -\frac{evr}{2}. \quad (161.1)$$

Тоді відношення $\frac{p_m}{L}$ називається *гіромагнітним* і воно рівне:

$$\Gamma = \frac{p_m}{L} = -\frac{e}{2m};$$

Взагалі кажучи в квантовій механіці можливі стани з сферично симетричним розподілом ймовірності знаходження електрона навколо ядра. В таких станах орбітальний механічний і магнітний моменти електрона строго рівні нулю. Виявляється, що крім орбітального, електрон ще має власний спіновий момент кількості руху. В стаціонарних станах проекція спіну електрона може набувати лише двох значень $\pm \frac{\hbar}{2}$. Спіну відповідає магнітний момент.

Механічний і магнітний моменти будь якого атома в тому числі і багатоелектронного векторно додаються із орбітальних та спінових моментів. Можуть існувати стани в яких орбітальні і спінові моменти скомпенсовані, тобто повний момент атома дорівнює нулю. Якщо відсутнє зовнішнє магнітне поле, то на електрон в атомі діють сили з боку атомного ядра й інших електронів. В постійному магнітному полі до цих сил додаються ще сила Лоренца. Електрон, що рухається по орбіті створює замкнутий струм, який має магнітний момент. Зовнішнє магнітне поле намагається розвернути орбіту електрона так, щоб цей магнітний момент був паралельний $\vec{H}$, що викликає *прецесію* орбіти навколо напрямку магнітного поля (рис. 183). Кутова частота такої прецесії:

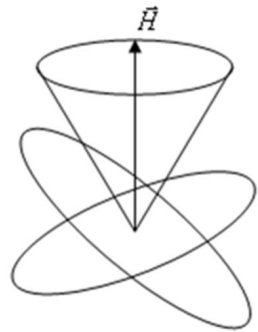


Рис. 183

Отже, за наявності зовнішнього магнітного поля внутрішній

$$\vec{\Omega}_L = \frac{e}{2m}. \quad (161.2)$$

Отже, за наявності зовнішнього магнітного поля внутрішній

рух електронів в атомі не змінюється, але атом в цілому отримує додаткового обертання з кутовою швидкістю Ω за рахунок прецесії електронних орбіт. Цей твердження називається *теоремою Лармора*. Прецесія орбіти еквівалентна додатковому руху електрона в полі $\vec{H}$, що приводить до появи додаткового струму ΔI і зв'язаного з ним додаткового магнітного моменту. Як видно з формули (161.2) кутова швидкість ларморівського обертання співпадає за напрямком з вектором $\vec{B}$, але оскільки заряд електрона від'ємний, то магнітний момент, що зв'язаний з цим обертанням направлений проти поля $\vec{B}$. В результаті створюється таке намагнічене середовище, що направлене проти зовнішнього поля $\vec{B}$, що є ознакою діамagnetизма.

Розрахуємо тепер магнітну сприйнятливість діамagnetиків. Електрон, що обертається по колу радіусом r з ларморівською частотою Ω має також додатковий момент кількості руху

$$|m[\vec{v}\vec{r}]| = mr^2\Omega \quad (161.3)$$

і отже, має додатковий магнітний момент

$$\Delta\vec{p}_m = -\frac{e[\vec{v}\vec{r}]}{2} = -\frac{er^2\Omega}{2} = -\frac{e^2r^2}{4m}\vec{H}. \quad (161.4)$$

Якщо вісь z перпендикулярна до площини кругової орбіти електрона, то

$$r^2 = x^2 + y^2. \quad (161.5)$$

Для того, щоб знайти додатковий магнітний момент всього атома за рахунок ларморівської прецесії електронних орбіт всіх атомів, треба просумувати додаткові магнітні моменти всіх його електронів

$$\begin{aligned} |\vec{p}_m| &= \sum_{k=1}^z |\Delta\vec{p}_{m_k}| = -\frac{e^2}{4m}H \sum_{k=1}^z |x^2 + y^2| = \\ &= -\frac{e^2}{4m}HZ(\bar{x}^2 + \bar{y}^2), \end{aligned} \quad (161.6)$$

де $\bar{x}^2, \bar{y}^2$ - усереднені параметри електронних орбіт в атомі.

Очевидно, що найпростіший спосіб розрахунку середнього такий:

$$\bar{x}^2 = \bar{y}^2 = \bar{z}^2 = \frac{1}{3}\bar{R}^2, \quad (161.7)$$

де $\bar{R}^2$ - це середнє значення квадрату віддалі електронів від центра атома.

Отже,

$$p_m = -\frac{Ze^2 H}{6m} \bar{R}^2. \quad (161.8)$$

Помноживши p_m на кількість атомів в одиниці об'єму знайдемо вираз для намагніченості

$$J = -\frac{Ze^2 N \bar{R}^2}{6m} H. \quad (161.9)$$

Тоді коефіцієнт, що стоїть біля $\vec{H}$ і буде магнітною сприйнятливістю діаманетика

$$\chi = -\frac{Ze^2 N \bar{R}^2}{6m}. \quad (161.10)$$

Для магнітної проникливості μ можна написати:

$$\mu = 1 + \chi = 1 - \frac{Ze^2 N \bar{R}^2}{6m}. \quad (161.11)$$

Проаналізуємо тепер температурну залежність магнітної сприйнятливості діаманетика. Зрозуміло, що енергія теплового руху частинок надто мала, щоб змінити внутрішній стан атома, тому для діаманетиків χ і μ не повинні залежати від температури, що узгоджується з експериментом.

Крім того, формула для χ правильно описує зміну χ в залежності від порядкового номера елемента Z .

Висновки:

1. *Діаманетним ефектом* називають появу у речовини, що знаходиться в магнітному полі, додаткового магнітного моменту, який направлений проти напрямку поля і пов'язаний з ним ларморовською прецесією ларморовських орбіт атомів.

2. Діаманетний ефект властивий всім без винятку речовинам, оскільки електронні орбіти всіх атомів прецесують в магнітному полі. Але в чистому вигляді тільки у таких речовин, атоми і молекули яких у відсутності магнітного поля мають магнітний момент рівний нулю.

3. Фізична причина появи ларморовської прецесії полягає в тому, що під час включення магнітного поля виникає вихрове електричне поле, яке і надає електронам додаткової кінетичної енергії. Взагалі кажучи ларморовське обертання є проявом явища електромагнітної індукції.

§162. Діаманетизм Ландау

В попередньому параграфі ми розглядали діаманетичні властивості речовин, що зумовлені зв'язаними електронами в атомі.

Розглянемо діамagnetизм зумовлений вільними електронами, електронами провідності. Покажемо, що в класичній статистиці вклад вільних електронів в магнітну сприйнятливість дорівнює нулю. З термодинаміки можна отримати, що магнітна сприйнятливість

$$\chi \approx \frac{\partial^2 E}{\partial H^2},$$

де E - повна енергія системи; H - напруженість магнітного поля.

Дана формула описує магнітну сприйнятливість матеріалу (χ) як другу похідну енергії (E) за напруженістю магнітного поля (H).

Магнітна сприйнятливість (χ) - це величина, яка характеризує, наскільки сильно матеріал намагнічується під дією зовнішнього магнітного поля. Вона показує як змінюється магнітний момент (або намагніченість) системи за зміни магнітного поля.

Енергія (E) системи в зовнішньому магнітному полі (H) може залежати від цього поля, і друга похідна енергії за магнітним полем показує, як змінюється крива енергії за зміни поля. Тому:

- $\frac{\partial E}{\partial H}$ - це перша похідна енергії за напруженістю магнітного поля, яка відповідає магнітному моменту;

- $\frac{\partial^2 E}{\partial H^2}$ - це друга похідна енергії за напруженістю магнітного поля, яка дає магнітну сприйнятливість.

Таким чином, формула $\chi \approx \frac{\partial^2 E}{\partial H^2}$ пов'язує магнітну сприйнятливість матеріалу з його енергетичною залежністю від магнітного поля.

Підррахуємо повну енергію E за наявності магнітного поля. В класичній статистиці

$$E = \bar{H} = \int H(\vec{r}, \vec{p}) \rho(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p}. \quad (162.1)$$

Взагалі кажучи функція розподілу визначається значенням повної енергії

$$\rho(\vec{r}, \vec{p}) = \rho[H(\vec{r}, \vec{p})]. \quad (162.2)$$

За наявності магнітного поля, функція Гамільтона має вигляд:

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}(\vec{r})}{c} \right)^2 + V(\vec{r}), \quad (162.3)$$

де $A(\vec{r})$ - це векторний потенціал магнітного поля, який пов'язаний з напруженістю співвідношенням:

$$\vec{H} = \text{rot} \vec{A}. \quad (162.4)$$

Під час інтегрування у виразі (162.1) вводять нову змінну інтегрування

$$\vec{p}' + p + \frac{eA(\vec{r})}{c} \quad (162.5)$$

і тоді границі інтегрування залишаються тими ж самими $\pm\infty$.

Таким чином, отриманий результат не буде залежати від жодних характеристик магнітного поля (для повної енергії). Тому

$$\chi \approx \frac{\partial^2 E}{\partial H^2} = 0,$$

причому E не буде функцією H .

Цей результат є наслідком того, що магнітне поле в класичній теорії не змінює енергії електрона, тобто не виконує роботи (бо сила Лоренца перпендикулярна до напрямку переміщення), а тільки відхиляє електрон.

Зовсім по іншому виглядає ситуація в квантовій механіці. Згідно з результатами квантової механіки орбітальний рух електрона в магнітному полі квантований, тобто власні значення енергії електрона залежать від магнітного поля, а саме:

$$E_{nkz} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}; \quad (162.6)$$

$$\omega_c = \frac{eH}{mc}. \quad (162.7)$$

З виразу (162.6) видно, що обчислена повна енергія залежить від магнітного поля. Тому вклад електронної провідності в магнітну сприйнятливості буде відмінний від нуля. Діамагнетизм вільних електронів провідності називається *діамагнетизмом Ландау*.

§163. Парамагнетизм іонів, атомів і молекул

У парамагнетиках намагніченість J і напруженість магнітного поля H пов'язані рівністю:

$$\vec{J} = \chi_p \vec{H}, \quad (163.1)$$

де $\chi_p > 0$.

Позитивний знак парамагнітної сприйнятливості означає, що в парамагнетиках магнітний момент напрямлений вздовж напруженості зовнішнього магнітного поля. Парамагнетиками є зазвичай речовини, атоми або молекули яких мають магнітні моменти у відсутності зовнішнього магнітного поля. Такі сформовані магнітні моменти є наприклад, у атомів і молекул з непарним числом електронів, у яких

повний спін не дорівнює нулю (атом натрію, що має 11 електронів, оксид азоту, що має 15 електронів та інші). Парамагнітними є також деякі атоми і йони із недобудованими внутрішніми ($3d$, $4d$, $5d$, $4f$, $5f$) оболонками, лужні метали, молекулярний кисень O_2 та ряд з'єднань. У більшості парамагнетиків магнітна сприйнятливість дуже залежить від температури. Однак, у лужних металів магнітна сприйнятливість практично не залежить від температури. За певних умов не залежить від температури також поляризаційний парамагнетизм (коли магнітний момент частинки виникає під впливом зовнішнього магнітного поля за відмінних від нуля недіагональних матричних елементів оператора магнітного момента).

Класична теорія парамагнетизму. В 1895 р. П. Кюрі встановив, що парамагнітна сприйнятливість газообмінного кисню обернено пропорційна абсолютній температурі

$$\chi_p = \frac{C}{T}, \quad (163.2)$$

де C - стала Кюрі.

В 1905 р. Ланжевен запропонував класичну теорію парамагнітної сприйнятливості, яка дала можливість отримати закон Кюрі (163.2) і з'ясувати мікроструктуру сталої Кюрі C .

Після деяких математичних перетворень отримаємо:

$$J = \frac{Np_m^2}{3kT} H, \quad (163.3)$$

де p_m - магнітний момент.

Тоді

$$\chi_p = \frac{Np_m^2}{3kT}, \quad (163.4)$$

що співпадає з законом Кюрі (163.2) для

$$C = \frac{Np_m^2}{3k}. \quad (163.5)$$

Для оцінки молярної парамагнітної сприйнятливості у (163.4) підставимо значення $N \sim 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}$ і $T \sim 300$ К. Тоді отримаємо:

$$\chi_p \sim 10^{-4} - 10^{-3}.$$

Для діамагнітної сприйнятливості ця величина сягає $\chi_d \sim -10^{-6}$. Тому в парамагнетиків слабкий діамагнітний ефект не проявляється і ним під час розрахунків нехтують.

Квантова теорія парамагнетизму. Теорія Ланжевена не враховує просторового квантування. Згідно класичної теорії,

магнітний момент частинки може мати будь-яку орієнтацію відносно $\vec{H}$. Згідно квантової теорії магнітний момент може мати лише деякі орієнтації. У випадку коли повний момент кількості руху (сума орбітального і спінового моментів) характеризується квантовим числом j , можливі $2j + 1$ проекції магнітного моменту:

$$\mu_z = g_j m_j \mu_B, \quad (163.6)$$

де g_j - множник Ланде; $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$; $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ А} \cdot \text{м}^2$ - магнетон Бора.

Після математичних перетворень знайдемо, що

$$\chi_p = \frac{N g_j^2 \mu_B^2 j(j+1)}{3kT}. \quad (163.7)$$

Дана формула описує парамагнітну сприйнятливості матеріалу в залежності від температури, концентрації, множника Ланде, магнетона Бора в магнітному полі. Ця формула використовується для аналізу та передбачення магнітних властивостей матеріалів в різних умовах.

Отже, квантова теорія парамагнетизму є важливим аспектом квантової механіки, що досліджує поведінку атомів та молекул у зовнішньому магнітному полі. Вона пояснює явища парамагнетизму, де атоми чи молекули з неспареними електронами демонструють слабку магнітну реакцію на зовнішнє магнітне поле. Основні принципи квантової теорії парамагнетизму включають врахування спіну електрона, його квантованої природи та взаємодії із магнітним полем. Дана теорія має велике практичне застосування в різних галузях, включаючи фізику матеріалів, магнітні резонансні методи та розвиток магнітної електроніки.

§164. Спіновий парамагнетизм Паулі

Незалежність парамагнітної сприйнятливості ряду металів від температури вказує на те, що в цих металах парамагнетизм зумовлений електронами провідності, які не підлягають класичній статистиці (Паулі, 1927 р.) Відповідно принципу Паулі для $T = 0$ і відсутності магнітного поля електрони заповнюють не тільки нульовий рівень, але і всі рівні до енергії Фермі ξ . Так як в кожному стані знаходяться два електрони з протилежними проекціями спіну (рис. 184, а), то магнітний момент системи дорівнює нулю. Під впливом магнітного поля електрони з додатною проекцією магнітного моменту мають потенціальну енергію

$$U_{\uparrow} = -\mu_B H,$$

а електрони з від'ємною проекцією магнітного моменту

$$U_{\downarrow} = \mu_B H.$$

За зміни від'ємної проекції магнітного моменту на додатну проекцію потенціальна енергія змінюється на величину

$$U_{\uparrow} - U_{\downarrow} = -2\mu_B H.$$

Однак у стані, в якому вже знаходиться електрон з додатною проекцією магнітного моменту, згідно принципу Паулі не може перейти інший електрон з такою ж проекцією магнітного моменту.

Переорієнтація магнітних моментів може відбуватися лише шляхом переходу електронів провідності на незаповнені рівні, енергія яких більша ξ . Такі переходи пов'язані із збільшенням кінетичної енергії електронів. Тоді заповнюються

«перевернутими» спінами лише такі рівні, енергія яких відрізняється від початкової не більш ніж на $2\mu_B H$ (рис. 184, б). Хімічний потенціал для спінів $\uparrow$ і $\downarrow$ однаковий (рис. 184, в).

Після деяких порівнянь та припущень можна побачити, що діамagnetна і парамагнетна сприйнятливості вільних електронів провідності поєднані співвідношенням

$$\chi_d = -\frac{1}{3}\chi_p. \quad (164.1)$$

Згідно з формулою відомо, що діамagnetна сприйнятливості завжди від'ємна та пропорційна парамагнетній сприйнятливості. Це вказує на те, що за збільшення парамагнетної сприйнятливості, діамagnetна сприйнятливості також збільшується, але з протилежним знаком. Цей зв'язок між парамагнетизмом і діамagnetизмом є важливим для розуміння магнітних властивостей різних матеріалів і може бути використаний для аналізу їхньої магнітної сприйнятливості в різних умовах.

§165. Феромагнетизм

У феромагнетиках (залізо, кобальт, гадоліній та ін., ряд сплавів і з'єднань) за достатньо низької температури існує спонтанна

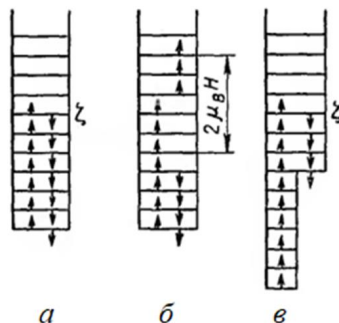


Рис. 184

намагніченість. В 1907 р. Вейсс використовував уявлення про молекулярне поле для опису основних властивостей феромагнетиків.

Згідно Вейссу у феромагнетику на магнітний момент атому діє ефективне магнітне поле, напруженість якого $H_{\text{еф}}$ визначається рівністю

$$H_{\text{еф}} = H + bJ, \quad (165.1)$$

де J - намагніченість феромагнетика; b - стала Вейсса.

Намагніченість феромагнетика визначається за формулою

$$J = Np_m L(a), \quad (165.2)$$

де $L(a)$ - функція Ланжевена; $a = \frac{p_m H}{kT}$ - стала, у якій замість H необхідно підставляти вираз (165.1) для $H_{\text{еф}}$:

$$J = Np_m L\left(\frac{p_m H}{kT}\right). \quad (165.3)$$

Після деяких перетворень можна отримати нерівність:

$$T < \frac{Nbp_m^2}{3k}. \quad (165.4)$$

В області температур, що задовольняють нерівності (165.4) (тобто низьких температур), намагніченість не зникає під час впливу магнітного поля, тобто речовина має спонтанну намагніченість і є феромагнетиком.

Температура Кюрі. В області високих температур

$$T > \frac{Nbp_m^2}{3k}. \quad (165.5)$$

Тоді в області температур, що задовольняють нерівності (165.5), речовина не має спонтанної намагніченості і є парамагнетиком.

Із (165.4) і (165.5) випливає, що температура

$$T_K = \frac{Nbp_m^2}{3k} \quad (165.6)$$

називається *точкою Кюрі*. І тоді для $T < T_K$ речовина є *феромагнетиком*, а для $T > T_K$ речовина є *парамагнетиком*.

На відміну від звичайних парамагнетиків, температурна залежність визначається не законом Кюрі (163.2), а *законом Кюрі-Вейсса*:

$$\chi = \frac{C}{T - T_K}. \quad (165.7)$$

Із (165.7) випливає, що вище точки Кюрі χ^{-1} лінійно залежить від різниці $T - T_K$. Експериментальні дані для різних феромагнетиків

вище їх точки Кюрі добре підтверджують лінійну залежність χ^{-1} від температури.

§166. Обмінна природа феромагнетизму

Розв'язання питання про природу феромагнетизму було дано в 1928 р. Я.І. Френкелем і пізніше В. Гейзенбергом. Із теорії атома гелію відомо, що вклад кулонівської взаємодії в енергію двохелектронної системи істотно залежить від взаємної орієнтації їх спінів.

Викладені вченими міркування (модель локалізованих електронів) застосовні, строго кажучи, тільки для розгляду феромагнітних діелектриків, в яких спіни зв'язані з вузлами кристалічної ґратки. Залізо, нікель, кобальт і ряд інших феромагнетиків є металами, властивості яких в значній мірі визначаються електронами провідності. Модель, яка враховувала існування як локалізованих, так і нелокалізованих електронів, була запропонована Шубіним і Вонсовським (1934 р.). В $[s - d(f)]$ -обмінній моделі, розробленій С.В. Вонсовським, основну роль в феромагнетизмі відіграють електрони внутрішніх недобудованих (d або f) атомних оболонок, а процеси переносу електричного заряду здійснюються головним чином колективізованими зовнішніми s -електронами, що мають обмінний зв'язок з $d(f)$ -електронами. Теорія $[s - d(f)]$ -обміну дає можливість пояснити основні властивості феромагнітних металів, особливо рідкоземельних металів (їх сплавів та з'єднань).

Лекція 47. КВАНТОВІ ГЕНЕРАТОРИ

§167. Лазери.

§168. Гелій-неоновий лазер.

§169. Хімічні лазери.

§170. Напівпровідникові лазери.

[2. §16-§19; 4. §24-§27]

§167. Лазери

В 1918 році Ейнштейном було показано, що є два типи випромінювання: спонтанне і вимушене.

Спонтанне випромінювання пов'язане з тим, що система може переходити із збудженого рівня на основний без взаємодії із зовнішнім джерелом. Другий тип випромінювання пов'язаний з тим, що перехід системи із збудженого рівня на основний зумовлюється її взаємодією із зовнішнім фотоном.

Таким чином, зовнішній фотон ніби змушує систему перейти із збудженого рівня на основний, такий тип випромінювання називається *вимушеним*.

Висновок. Отже, А. Ейнштейн показав, що за наявності зовнішнього фотона система може перейти в збуджений стан поглинувши фотон, і навпаки може перейти із збудженого рівня на основний, випромінюючи один фотон.

В 1938 році фізик В.О. Фабрикант показав, що в середовищі з інверсною заселеністю енергетичних рівнів можливе підсилення зовнішнього випромінювання якраз за рахунок вимушених переходів. *Середовищем з інверсною заселеністю енергетичних рівнів* називається таке середовище, у якому в збудженому стані перебуває більше атомів чи молекул ніж в основному. Покажемо, що середовище з інверсною заселеністю має від'ємну абсолютну температуру. Позначимо через n - число молекул, які перебувають в основному стані, тоді згідно з розподілу Максвелла-Больцмана

$$n_1 \sim e^{-\frac{E_1}{kT}}.$$

Нехай n_2 число молекул, які перебувають в збудженому стані

$$n_2 \sim e^{-\frac{E_2}{kT}}, \\ E_2 > E_1.$$

Тоді

$$\frac{n_1}{n_2} = e^{\frac{E_1 - E_2}{kT}}.$$

Визначимо тепер із цього співвідношення температуру:

$$\ln \frac{n_1}{n_2} = \frac{E_2 - E_1}{kT}.$$

Звідси

$$T = \frac{E_2 - E_1}{k \ln \frac{n_1}{n_2}}.$$

Оскільки $n_1 < n_2$, а $E_2 > E_1$, то в середовищі з інверсною залежністю $T < 0$. Розглянутий нами спосіб підсилення електромагнітних хвиль, ще не може бути використаний на пряму для

створення лазерів, оскільки *лазер* - це пристрій, що генерує електромагнітні хвилі.

Як приклад лазера, розглянемо рубіновий лазер. Рубін представляє собою оксид алюмінію з домішками хрому (Al_2O_3 ; Cr). Взагалі кажучи, оксид алюмінію є діелектриком з досить широкою забороненою зоною в якій і лежать основний і збуджений рівні (енергетичні) електронна в атомі хрому.

На рисунку 185 схематично представлено енергетичні рівні рубінового лазера: 1 - основний рівень атома хрому; 2, 3 - збуджені рівні електрона в атомі хрому.

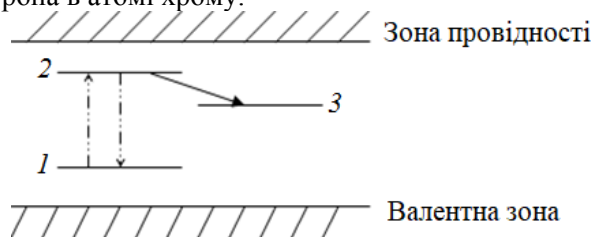


Рис. 185

Причому, рівень 3 метастабільний, тобто на цьому рівні електрони можуть перебувати довший час ніж на рівні 2.

Нехай за допомогою зовнішнього джерела електрон переходить з основного рівня на збуджений. На рисунку 186 представлена траєкторія руху електрона з основного рівня на збуджений.

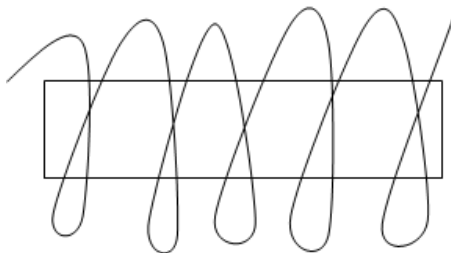


Рис. 186.

Значна частина електронів повертається знову на рівень 1, а більшість на рівень 3 (рис. 187).

Причому енергія переходу 2, 3 передається фононам, тобто переходить в тепло. Коли в більшості атомів валентний електрон опиниться на метастабільному рівні 3, то тоді можна сказати, що в

середині створена інверсна заселеність по відношенню до рівня 1.

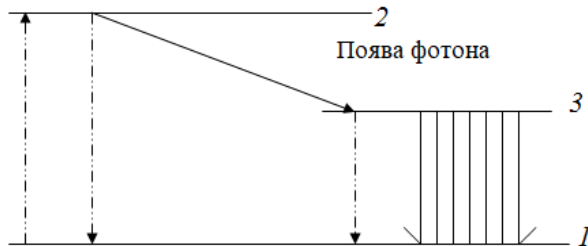


Рис. 187

Якщо під час спонтанного переходу між рівнями 3 і 1 викликається вимушений перехід в багатьох атомах хрому, напрямок і поляризація, якого співпадають з напрямком осі поляризації, то такий пучок вимушеного випромінювання буде рухатися паралельно осі кристалу викликаючи під час свого проходження наступне проходження електромагнітної хвилі.

Для того, щоб випустити проміння з резонатора використовують затвори різного типу (рис. 188):

1. Механічний - це зубчате колесо з отвором.

2. Квантово-оптичну комірку Керра. Принцип її роботи ґрунтується на тому, що коефіцієнт пропускання в такій комірці залежить від напруженості електричного поля і може стрибкоподібно змінювати своє значення. Середовище тоді просвітлюється і світло виходить з резонатора (рис. 188).



Рис. 188

Основні переваги лазерного випромінювання полягають в тому, що воно є монохроматичним і когерентним.

Розглянемо коротко принцип роботи чотирьохрівневого лазера (рис. 189). За чотирьохрівневою системою працює лазер на

неодимовому склі, а також лазери на флюориті кальцію (CaF_2) з невеликими домішками диспрозія або самарія. У звичайному стані CaF_2 є діелектриком.

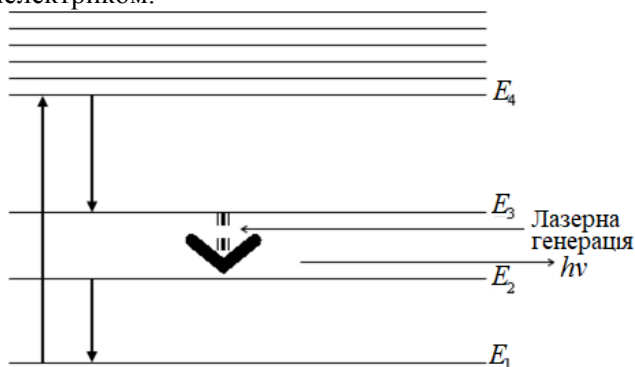


Рис. 189

Енергетичні рівні диспрозія E_1 , E_2 , E_3 лежать в забороненій зоні, E_1 - це основний рівень, E_2 , E_3 - це збуджені, а E_4 - рівень провідності.

На рисунку 189 відображено E_1 , E_2 , E_3 - це енергетичні рівні диспрозія в забороненій зоні флюориту кальцію; E_4 - зона провідності CaF_2 .

Накачка лазера здійснюється збудженням електрона в іоні диспрозія з рівня E_1 на рівень E_4 . За рахунок того, що смуга E_4 досить широка, накачку можна робити білим світлом. Потужність лампи накачки може не перевищувати 20 Вт. Оскільки час життя в зоні E_4 невеликий, то електрони здійснюють безвипромінювальний перехід на метастабільний рівень E_3 . Оскільки енергетичний рівень E_2 розташований достатньо високо над рівнем E_1 , то за кімнатних температур він практично незаселений електронами. Тому для того, щоб створити інверсну заселеність між рівнями E_2 , E_3 не треба як в рубіновому лазері переводити в збуджений стан більше половини атомів. Достатньо збудити 1/10-1/15 частину. Лазерна генерація здійснюється між рівнями E_3 і E_2 за тим же принципом, що і в рубіновому лазері. Тобто, спочатку внаслідок спонтанного переходу з'являється один квант з енергією $h\nu$, який і викликає лавиноподібний перехід в інших іонах диспрозію. Лазер на CaF_2 генерує в інфрачервоній області, довжину хвилі $\lambda \sim 2,36$ мікрон.

§168. Гелій-неоновий лазер

В газорозрядній трубці, де створені умови для оберненого зв'язку, атоми неону збуджуються розрядом невисокої напруги. У цьому випадку електрони в них переходять на рівень E_2 і E_3 (рис. 190). В процесі релаксації вони переходять на енергетичний рівень E_4 , E_6 , E_2 і пізніше на метастабільний рівень E_5 . Інверсна заселеність може бути створена між параметрами E_3 , E_6 (червона область) E_3 , E_4 (випромінювання в інфрачервоній) E_2 , E_6 (у інфрачервоній) і між E_4 , E_6 (теж у інфрачервоній) областях.

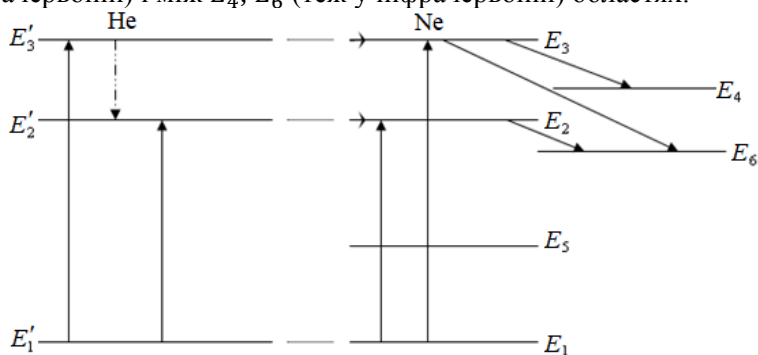


Рис. 190

Розглянемо генерацію під час переходу між рівнями між E_3 , E_6 . Для того, щоб створити інверсну заселеність між цими рівнями треба деяку частину атомів перевести на рівень E_3 . Але більшість атомів буде перебувати на метастабільному рівні E_5 , що буде сильно перешкоджати створенню інверсної залежності.

Атоми не мають енергетичних рівнів E'_1 , E'_2 , E'_3 , що практично співпадають з рівнями неону. Під час накачки вони збуджуються на E'_2 , E'_3 , але повернутись в початковий стан на рівень E'_1 не можуть, оскільки випромінювальний перехід на цей рівень заборонений. Перебуваючи в збудженому стані, атоми не стикаючись з атомами неону збуджують їх передаючи під час зіткнення енергію, що вони зберегли. Атоми гелію проходять у цьому випадку в основний стан. Таким чином, атоми гелію (He) ніби додатково накачують атоми, що створює умови для появи інверсної заселеності.

§169. Хімічні лазери

До цих пір ми класифікували лазери за типом активного

середовища. Наприклад, твердотільні (кристал), газові лазери, рідинні лазери, напівпровідникові лазери. Існує інша класифікація лазерів, яка пов'язана з способом накачки лазера. В хімічних лазерах накачка здійснюється за рахунок енергії, отриманої під час перебігу хімічних реакцій. Так наприклад, в одному із поширених типів лазерів у резонатор закачують суміш водню і хлору (Cl_2) в результаті утворюється збуджена енергія



Причому в молекулі HCl збуджені коливні ступені вільності. Виявляється, що енергію із запасом під час збудження коливних ступенів вільності віддати в середовище набагато важче ніж енергію поступального руху. Це означає що за достатньо довгого перебігу реакції утворюється значна частина молекул, в яких збуджені коливні ступені вільності. Для того, щоб створити інверсну заселеність між збудженими коливними ступенями вільності застосовують інколи і додаткові джерела збудження. Вся реагуюча суміш перебуває в резонаторі звідки і отримують випромінювання. Так працює один з варіантів хімічних лазерів. Дуже часто енергія виходу хімічних газів використовується для накачування іншого середовища, яке і буде генерувати лазерне випромінювання.

§170. Напівпровідникові лазери

Розглянемо один із можливих напівпровідникових лазерів на гомопереході. Для створення напівпровідникового (НП) лазера, обидві області p – n -переходу сильно легують домішками. В результаті цього рівень Фермі електронів в такому сильно легovanому напівпровіднику в n -області опиняється зона провідності (рис. 191, а).

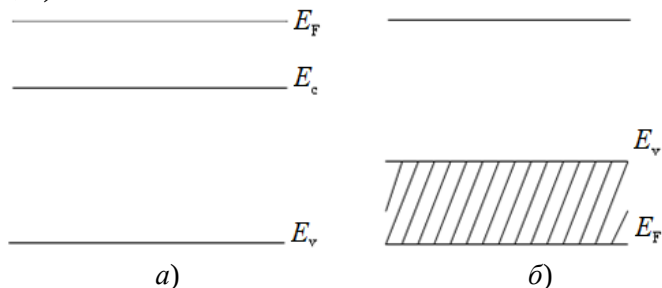


Рис. 191

У цьому випадку в напівпровіднику p -типу рівень Фермі для дірок опиняється в валентній зоні (рис. 191, б)). Під час контакту напівпровідників p - і n -типу умовою рівноваги є рівність хімічних потенціалів електронів p - і n -області, дірок в n - і p -області. В результаті контакту отримуємо картину на рисунку 192.

Під час прикладання невеликого прямого зміщення висота бар'єру понижується в обведеній зоні. Навпроти електронів зони провідності розташовуються дірки валентної зони. Тоді починається процес рекомбінації електронів з дірками, а енергія активації виділяється у вигляді квантів світла $h\nu$. Такий $p-n$ -перехід називається *світлодіодом*. Для того, щоб такий світлодіод став лазером необхідно створити резонатор.

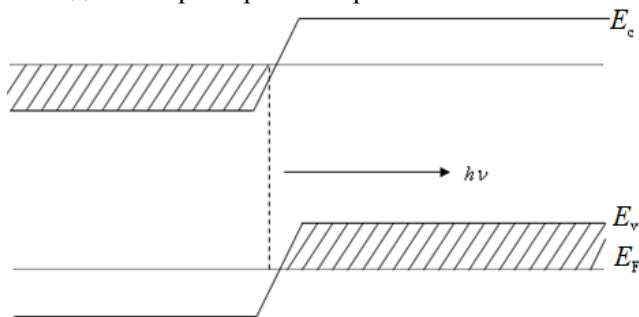


Рис. 192

В напівпровідникових діодах резонатор роблять таким чином: кристал напівпровідника сколюють рівно вздовж площини симетрії і площина сколу практично дзеркальна. Більшість напівпровідникових діодів випромінюють в близькій інфрачервоній, жовто-червоній області та до ультрафіолетової вони не доходять.

Лекція 48. НАДПРОВІДНІСТЬ І НАДТЕКУЧІСТЬ

§171. Надпровідність.

§172. Високотемпературна надпровідність.

§173. Ефект Мейснера.

§174. Квантова рідина.

§175. Надтекучість рідкого гелію.

[2. §20, §21]

§171. Надпровідність

В 1911 році Камерлінг-Оннес встановив, що за температури $T = 4,2 \text{ K}$ провідність ртуті стрибком падає до 0 (рис. 193).

Якщо в кільці провідника створити струм, то він може існувати необмежено довго. Пояснити *явище надпровідності* прийшлося через розуміння фізичної суті явища надтекучості рідкого гелію, яке ніде і ніколи практично не використовувалось. Оскільки, надтекучість зв'язана з Бозе конденсацією рідкого гелію, то для пояснення явища надпровідності Бардіном, Купером і Шриффером й незалежно від них Боголюбовим була розроблена теорія надпровідності, яка базувалась на можливості утворення з електронів бозонного газу електронних пар (куперівських пар) (рис. 194). Виявляється, математично можна показати, що під час взаємодії електрона з кристалічною ґраткою, коли один електрон випромінює фонон, а другий електрон його поглинає, то взаємодія цих двох електронів може бути описана як ефективне притягання. Таку пару електронів називають *куперівською*. Спін такої пари цілий. В бозонному газі куперівських пар, можливе явище Бозе конденсації, а значить *явище надтекучості*. Надтекучість бозонного газу куперівських пар і дає надпровідність.

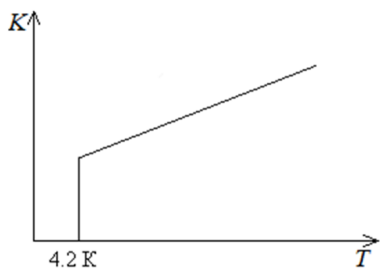


Рис. 193

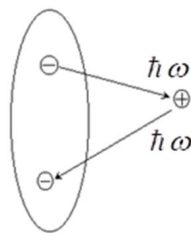


Рис. 194

§172. Високотемпературна надпровідність

У 1986 році швейцарські співробітники фірми IBM Берлюдц і Мюлер дослідили кристало-керамічні сплави, отримали високотемпературну надпровідність за рекордної на той час температури порядку $T \approx 30 - 35 \text{ K}$ (до цього часу $T \approx 21 \text{ K}$). Через два місяці після їх роботи, група американських та японських фізиків експериментально показала, що за додавання металокераміки до лужноземельних сплавів температура переходу піднята до $90 - 100 \text{ K}$, а це означає, що надпровідність стала можлива за температури рідкого азоту. На сьогоднішній день є дослідження, у яких досягнуто

стан надпровідності за температури порядку 180 К.

§173. Ефект Мейснера

В 1933 р. В. Мейснер і Р. Оксенфельд виявили, що у метал, який знаходиться у надпровідному стані, за достатньо малих напруженостей зовнішнього магнітного поля магнітний потік не проникає. У цьому випадку всередині масивного надпровідника індукція магнітного поля дорівнює нулю ($\vec{B} = 0$). Так як $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{J}$, то рівність $\vec{B} = 0$ призводить до наступної залежності намагніченості надпровідника $\vec{J}$ від напруженості магнітного поля $\vec{H}$:

$$\vec{J} = -\frac{1}{4\pi}\vec{H}. \quad (173.1)$$

Звідси випливає, що надпровідник можна розглядати як наддіамагнетик з сприйнятливістю $\chi_d = -\frac{1}{4\pi}$ (пригадаємо, що у звичайних діамагнетиків $\chi_d \sim -10^{-6}$).

До ефекту Мейснера підводить рівняння, запропоноване в 1935 р. Ф. Лондоном і Г. Лондоном (друге рівняння Лондонів)

$$\text{rot}\vec{j}_s = -\frac{n_s e^2}{mc}\vec{B}, \quad (173.2)$$

де n_s - концентрація; j_s - густина струму надпровідних електронів.

Рівняння Лондонів (173.2) отримано за постійної концентрації n_s надпровідних електронів. В 1950 р. В.Л. Гінзбург і Л.Д. Ландау узагальнили теорію Лондонів з метою врахування залежності n_s від координат. Це врахування особливо важливе під час розгляду межі між нормальною і надпровідною областями, де n_s змінюється від нуля (в області нормального стану) до кінцевого значення (в області надпровідного стану). Із теорії Гінзбурга і Ландау випливає, що в залежності від знаку поверхневої енергії на межі між нормальною і надпровідною областями необхідно розрізнити надпровідники I і II роду.

У надпровідниках I роду (додатна поверхнева енергія) ефект Мейснера існує за $H < H_K$ (де H_K - критичне значення напруженості магнітного поля, за якого зникає надпровідний стан). На рисунку 195 показана залежність J від H для циліндра із надпровідника I роду, коли напруженість магнітного поля напрямлена паралельно осі циліндра. Із рисунка 195 видно, що для $H < H_K$ виконується рівність (173.1) і спостерігається ефект Мейснера. За $H = H_K$ встановлюється нормальний стан і магнітний момент перетворюється в нуль.

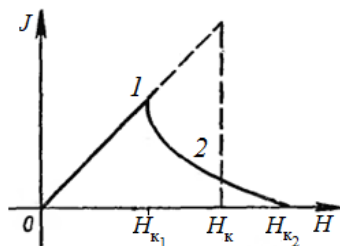


Рис. 195

Суцільною кривою на рисунку 195 показана залежність J від H для надпровідників II роду (від'ємна поверхнева енергія). Із рисунка 195 видно, що у надпровідника II роду повний ефект Мейснера існує тільки за достатньо малих напруженостей магнітного поля $H < H_{K1}$. Для $H_{K1} < H < H_{K2}$ магнітне поле частково проникає в зразок і виникає змішаний стан. За $H = H_{K2}$ магнітне поле повністю проникає в зразок.

Змішаний стан в області $H_{K1} < H < H_{K2}$ було експериментально виявлено Л. Шубніковим в 1937 р. Згідно О. Абрикосову (1956 р.) у змішаному стані проникнення магнітного поля відбувається шляхом утворення ниток, центри яких знаходяться в нормальному стані.

§174. Квантова рідина

Квантовою рідиною називається система сильно взаємодіючих частинок, що не має просторової періодичності, за досить низьких температур, коли суттєві квантові ефекти. Як відомо, що електрони провідності надпровідника утворюють квантову рідину.

Згідно з Ландау (1941 р.) енергетичні рівні квантової рідини відповідають стаціонарним станам рідини в цілому, а не станам окремих частинок. За досить низьких температур збуджуються лише рівні, розташовані поблизу основного рівня енергії рідини. Ці слабозбуджені стани можна розглядати як сукупність елементарних збуджень або квазічастинок.

Як відомо, теорія звичайних рідин значно складніша теорії розріджених газів. Це зумовлено тим, що в рідині густина частинок більша, ніж у газі, і тому в рідині взаємодія частинок суттєвіша, ніж у газі. В цьому ж напрямі впливає зниження температури, яке призводить до зменшення середньої кінетичної енергії і, отже, до

збільшення ролі потенціальної енергії взаємодії частинок.

За досить низьких температур, коли квантові ефекти не маскуються безладним тепловим рухом частинок, взаємозалежність руху окремих частинок стає ще більш суттєвою завдяки їх хвильовим властивостям. Так, у системі тотожних частинок принцип нерозпізнаності призводить, як відомо, до певної симетрії хвильової функції системи щодо перестановок будь-якої пари частинок незалежно від відстані між ними. Водночас посилення взаємозалежності руху окремих частинок призводить до можливості вивчення квантової рідини як єдиної квантовомеханічної системи.

Якщо квазічастинки підпорядковуються статистиці Фермі, то квантова рідина називається *фермі-рідиною*. Якщо квазічастинки підпорядковуються статистиці Бозе, то квантова рідина називається *бозе-рідиною*.

Прикладом фермі-рідини є система взаємодіючих електронів провідності у нормальному стані за низьких температур (вище за T_K). Іншим прикладом фермі-рідини є рідкий ${}^3\text{He}$. Квантовий характер цієї рідини проявляється, зокрема, у тому, що за відсутності зовнішнього тиску вона не твердне за найнижчих температур (перехід ${}^3\text{He}$ у рідкий стан відбувається у звичайних умовах для $T = 3,19\text{ K}$).

Фермі-рідина не є обов'язковим станом сильно взаємодіючих ферміонів. Якщо, наприклад, частинки з напівцілим спіном об'єднуються в пари, що мають цілий спін, то квантова рідина може виявитися бозе-рідиною. Прикладом бозе-рідини є рідкий ${}^4\text{He}$.

§175. Надтекучість рідкого гелію

За атмосферного тиску ${}^4\text{He}$ перетворюється на рідкий стан за температури $4,2\text{ K}$. В області температур $2,18\text{ K} < T < 4,2\text{ K}$ рідкий гелій має властивості, характерні для звичайної рідини. У цій області температур гелій називається He I . За $T_K = 2,18\text{ K}$ He I перетворюється на низькотемпературний He II .

У 1938 р. П.Л. Капіца відкрив у He II *явище надплинності*. Виявилося, що для значення швидкості, меншого деякого критичного значення v_K , He II протікає без тертя (в'язкість менша 10^{-11} Пуаз) крізь тонкі капіляри або щілини, ширина яких менше 10^{-5} см .

Під час вимірювання в'язкості методом спостереження згасання крутильних коливань маятника, зануреного в рідину, було виявлено, що в'язкість He II мало відрізняється від в'язкості He I . У He II спостерігається механокалоричний ефект: за витікання з

посудини через тонкий капіляр частина рідини, що залишилася в посудині нагрівається. Навпаки, під час втікання через капіляр у посудину рідина в посудині охолоджується.

Спостерігається також зворотний термомеханічний ефект: якщо дві посудини, у яких He II знаходиться за температури $T_1 \neq T_2$, з'єднані капіляром, то виникає перебіг He I з посудини з меншою температурою в посудину з більшою температурою.

У 1941 р. Л.Д. Ландау показав, що властивість надплинності впливає з постулюваного ним спектру елементарних збуджень $\mathcal{E}(p)$, показаного на рисунку 196.

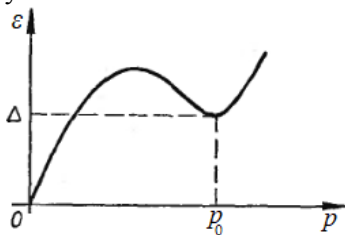


Рис. 196

Закон дисперсії, показаний на цьому рисунку, був експериментально підтверджений шляхом вивчення розсіювання нейтронів в рідкому гелії (Д. Ларсен, Д. Хеншоу, М. Ярнейль та ін.).

Лекція 49. ПЛАЗМОВИЙ СТАН РЕЧОВИНИ

§176. Основні характеристики плазми.

§177. Електричне поле в плазмі.

§178. Плазма в магнітному полі.

§179. Плазмовий стан речовини в природі.

§180. Фізика плазми та перспективи її застосування.

[1. §100-§104; 4. §28-§35]

§176. Основні характеристики плазми

Плазмою називають іонізований газ з досить високою концентрацією заряджених частинок, який є квазінейтральним, тобто містить практично однакові кількості позитивних і негативних зарядів. Серед характеристик, які визначають особливості плазми є: температура; концентрація; електропровідність; теплопровідність;

коефіцієнт іонізації α ; просторовий масштаб розділення d_0 , тенденція до збереження електричної нейтральності.

Однією з основних характеристик класичної плазми, що знаходиться в тепловій рівновазі, є її температура T . Плазма довгий час може існувати, коли вона характеризується двома температурами: електронною T_e та іонною T_i . Плазму, в якій $T_i = T_e$, називають *ізотермічною*. Добути її експериментально досить важко. Плазма, для якої $T_e \neq T_i$, називається *неізотермічною*.

Плазму, яка використовується в газорозрядних приладах, називають *холодною*, а високотемпературну плазму, потрібну для термоядерного синтезу називають *гарячою* ($T_e \approx T_i = 10^8 - 10^9$ К).

Плазма вважається низькотемпературною, якщо виконується нерівність

$$kT \ll I, \quad (176.1)$$

де I - потенціал іонізації нейтральних атомів або молекул плазми.

Для атомарного водню $I = 13,59$ еВ, що відповідає температурі порядку 10^5 К. Тому плазма є *низькотемпературною* в області $T < 10^4 - 10^5$ К. В області $T > 10^6$ К плазма є *високотемпературною*.

В класичній плазмі кінетична енергія частинки має в середньому порядок величини

$$E_k = \frac{3}{2} kT. \quad (176.2)$$

Якщо енергія взаємодії частинок плазми дуже мала в порівнянні з їх середньою кінетичною енергією, то плазма сприймається як *ідеальна*.

У майже повністю іонізованій плазмі кулонівська взаємодія між частинками характеризується потенціальною енергією

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0}, \quad (176.3)$$

де $Z_1 e$ і $Z_2 e$ - електричні заряди частинок, що взаємодіють; r_0 - середня відстань між ними, що пов'язана з концентрацією заряджених частинок плазми n рівністю

$$n \frac{4\pi}{3} r_0^3 = 1. \quad (176.4)$$

Для класичної ідеальної повністю іонізованої плазми виконується нерівність

$$\eta_{\text{кл}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0 k T} \ll 1. \quad (176.5)$$

Нерівність (176.5) - це *нерівність Кірквуда-Онсагера*.

Умова ідеальності квантової плазми має вигляд:

$$\eta_{\text{кл}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0 \xi} \ll 1, \quad (176.6)$$

де ξ - енергія Фермі.

Наступною характеристикою плазми є її *електропровідність*, яка залежить від концентрації вільних електронів та іонів і тому для різних плазм має різну величину. Деякі плазми (наприклад, електрична дуга прожектора) мають електропровідність, яка наближається до електропровідності напівпровідників, а зоряна плазма в деяких випадках має проводити не гірше за мідь.

З електропровідністю плазми нерозривно пов'язане її світіння. Воно настільки невід'ємне від її електропровідності, що є видимою ознакою проходження струму в плазмі.

Високотемпературна плазма відзначається високою *теплопровідністю*. Коефіцієнт теплопровідності повністю іонізованої плазми за відсутності зовнішніх полів змінюється пропорційно $T^{\frac{5}{2}}$. Наприклад, воднева плазма за температури 10^6 К має теплопровідність у 30 раз більшу, ніж мідь за кімнатної температури. Таке швидке зростання теплопровідності зі зростанням температури пояснюється збільшенням середньої довжини вільного пробігу частинок у плазмі.

Коефіцієнт іонізації α визначає ступінь іонізації, тобто відношення числа заряджених частинок до загального числа частинок у системі. Залежно від числа α розрізняють *слабоіонізовану плазму* (α становить частини відсотка), *помірно іонізовану* (α становить кілька відсотків) і *повністю іонізовану* ($\alpha \rightarrow 100\%$). Слабоіонізованою плазмою є іоносфера. Сонце, гарячі зорі. Деякі міжзоряні хмари, які мають високі температури, складаються з повністю іонізованої плазми.

Просторовий масштаб розділення d_0 дає кількісний критерій поняття «плазми», тобто це є кількісний критерій об'єму, в якому зберігається квазінейтральність плазми; деякий геометричний параметр.

Просторовий масштаб розділення зарядів можна розрахувати за формулою:

$$d_0 = \sqrt{\frac{kT}{8\pi n e^2}} \approx 5 \sqrt{\frac{T}{n}} \text{ (см)}. \quad (176.7)$$

Отже, квазінейтральність плазми зберігається лише за тієї умови, коли лінійні розміри області, зайнятої іонізованим газом (наприклад, радіус сферичної колби, в якій міститься газ), у багато разів більші за d_0 , тобто, коли виконується нерівність

$$r \gg 5 \sqrt{\frac{T}{n}}. \quad (176.8)$$

Оскільки за заданої температури просторовий масштаб розділення зарядів тим менший, чим більша концентрація частинок в іонізованому газі, тобто чим менша його густина, то густа плазма практично завжди буде квазінейтральною, а розріджена плазма квазінейтральності не зберігає.

Із розрахунків відомо, що просторовий масштаб розділення для густої плазми в 10000 раз менший, ніж для розрідженої. Також можна дати визначення плазми через просторовий масштаб розділення зарядів: *плазмою* називається іонізований газ лише тоді, коли просторовий масштаб розділення зарядів значно менший від лінійних розмірів області зайнятої іонізованим газом.

Тенденція до збереження електричної нейтральності, полягає в тому, що коли випадково в якому-небудь місці утвориться надлишок того чи іншого заряду (тобто порушиться нейтральність), то це викличе появу великого електростатичного поля, яке відразу ж відновлює попередній стан.

Під час вивчення розрідженої плазми замість моделі безперервного середовища більш адекватною виявляється використання у ряді випадків *моделі незалежних частинок*. Застосування моделі суцільного середовища або моделі незалежних частинок залежить від характеру розглянутих завдань.

§177. Електричне поле в плазмі

Якщо в деяких областях, зокрема, нейтральної плазми густина електронів відрізняється від густини іонів, то кулонівська потенціальна енергія плазми збільшується. Електричний потенціал визначається рівнянням Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon} q = -\frac{4\pi}{\varepsilon} (n_i Z - n_e), \quad (177.1)$$

де ε - діелектрична стала плазми.

У випадку класичної нейтральної плазми відповідно розподілу Больцмана

$$n_e = n e^{\frac{e\varphi}{kT}}, \quad (177.2)$$

$$n_i Z = n e^{-\frac{Ze\varphi}{kT}}. \quad (177.3)$$

Вирази (177.2) і (177.3) підставимо у формулу (177.1)

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{4\pi en}{\varepsilon} \left(e^{\frac{Ze\varphi}{kT}} - e^{\frac{e\varphi}{kT}} \right). \quad (177.4)$$

Якщо

$$\frac{Ze\varphi}{kT} \ll 1,$$

то обмежуючи розкладання експонент членами першого порядку по $\frac{Ze\varphi}{kT}$ із виразу (177.4), отримаємо

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi e^2 n}{\varepsilon kT} (Z + 1) \varphi. \quad (177.5)$$

Введемо позначення:

$$\chi^2 = \frac{4\pi e^2 n}{\varepsilon kT} (Z + 1), \quad (177.6)$$

де літера χ - читається як «хі».

Підставимо значення виразу (177.6) у формулу (177.5)

$$\nabla^2 \varphi - \chi^2 \varphi = 0 \quad (177.7)$$

Розв'язок рівняння (177.7) буде мати сферично-симетричний вигляд:

$$\varphi = A \frac{e^{-\chi r}}{r}. \quad (177.8)$$

Порівняння цієї величини з кулонівським потенціалом точкового заряду, що виходить з виразу (177.8) для $\chi = 0$, показує, що у плазмі під час місцевих порушень нейтральності виникає перерозподіл зарядів, що екранує кулонівську взаємодію. Потенціал у виразі (177.8) можна записати так:

$$\varphi = A \frac{e^{-\frac{r}{r_{Д-Х}}}}{r}, \quad (177.9)$$

де

$$r_{Д-Х} = \frac{1}{\chi}. \quad (177.10)$$

Величина $r_{Д-Х}$, що характеризує відстань, на якій чисельник (177.9) зменшується в e раз, називається *радіусом Дебая-Хюккеля*. Ця

характерна довжина була введена у 1923 р. у зв'язку з теорією електролітів. Враховуючи, що у класичній плазмі середня кінетична енергія $\bar{E}_k$ частки визначається виразом

$$\bar{E}_k = \frac{3}{2} kT, \quad (177.11)$$

можна вираз (177.6) записати у вигляді:

$$\chi^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\varepsilon \bar{E}_k} (Z + 1). \quad (177.12)$$

Якщо електронний компонент плазми є виродженим, необхідно $\bar{E}_k$ замінити на енергію Фермі ξ . Тоді

$$\chi_e^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\varepsilon \xi}, \quad (177.12)$$

де χ_e - значення χ для електронної компоненти.

Величина

$$r_{T-\Phi} = \frac{1}{\chi_e} \quad (177.13)$$

називається *радіусом Томаса-Фермі*.

У випадку виродженої електронної компоненти для великих r є осцилююча залежність густини від r . Це обумовлено різкою зміною функції розподілу електронів біля поверхні Фермі.

§178. Плазма в магнітному полі

Оскільки плазма являє собою газ, який складається з заряджених частинок, то під час внесення її в магнітне поле вона виявляє властивості, яких не має звичайний газ. Найважливішою її властивістю є те, що за допомогою магнітного поля можна керувати рухом її частинок. Тобто зовнішнє магнітне поле істотно впливає на властивості плазми, що містить заряджені частинки.

Для дослідження поведінки плазми в магнітному полі проаналізуємо спочатку рух окремої частинки, а потім розглянемо вплив магнітного поля на плазму як на деяке суцільне середовище.

1. Якщо частинка рухається в магнітному полі, то на неї діє сила Лоренца

$$\vec{F}_L = \frac{q}{c} [\vec{v} \vec{H}], \quad (178.1)$$

де q - заряд частинки; v - швидкість частинки; H - напруженість магнітного поля.

Рівняння руху для даного випадку можна записати:

$$m\vec{a} = \vec{F}_L. \quad (178.2)$$

Розпишемо у виразі (178.2) деякі із величин, отримаємо

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{c} [\vec{v}\vec{H}]. \quad (178.3)$$

Тоді прискорення частинки в магнітному полі $\vec{H}$ дорівнює

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{mc} [\vec{v}\vec{H}] \quad (178.4)$$

і завжди перпендикулярне до швидкості, внаслідок чого траєкторія частинки викривляється, а абсолютна величина залишається незмінною. Отже, залишається незмінною її кінетична енергія.

В сталому й однорідному поперечному магнітному полі частинка рухається по колу радіуса

$$r_L = \frac{mvc}{qH}, \quad (178.5)$$

який називається *ларморівським радіусом*.

Відомо, що кутова швидкість обертання

$$\omega = \frac{v}{r_L}. \quad (178.6)$$

Підставляючи значення ларморівського радіуса з виразу (178.5) у вираз (178.6), отримаємо

$$\omega = \frac{qH}{mc}. \quad (178.7)$$

Величина ω у формулі (178.7) називається *циклічною частотою*, тому що вона дорівнює кутовій частоті, з якою обертається заряджена частинка в циклотроні.

Якщо початкова швидкість v не перпендикулярна до H , то магнітне поле діятиме лише на перпендикулярну складову швидкості. Тому в сталому і однорідному магнітному полі рух зарядженої частинки являє собою комбінацію циклотронного обертання і поступального руху вздовж силової лінії, внаслідок чого її траєкторією буде гвинтова лінія (рис. 197).

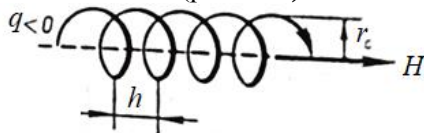


Рис. 197

Важливим є випадок руху зарядженої частинки в постійному

неоднорідному магнітному полі (рис. 198).

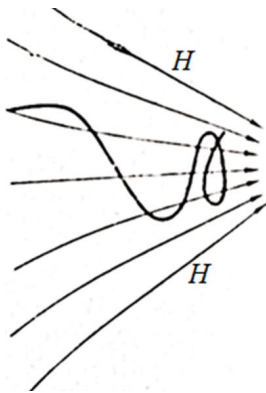


Рис. 198

Тут напруженість поля зростає зліва направо і тому силові лінії утворюють збіжний пучок. Тоді напруженість частинки почне зміщуватись у бік слабшого поля

$$H = \frac{H_0}{\sin^2 \alpha_0}, \quad (178.8)$$

де H_0 - напруженість поля у початковій точці траєкторії; α_0 - кут, який утворюють вектор швидкості з напрямом силової лінії.

2. Магнітогідродинамічний опис плазми дає можливість використати найпростішу модель провідної рідини. Наука, яка вивчає рух провідних рідин або газів способом сумісного розв'язання рівнянь гідродинаміки і електродинаміки, називається *магнітною гідродинамікою* або *магнітогідродинамікою*.

Характерною властивістю магнітогідродинамічного руху є захоплення магнітного поля добре провідною рідиною. У випадку ідеальної провідності ($\sigma \rightarrow \infty$) має місце рівняння

$$\vec{j} = \sigma \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}\vec{H}] \right). \quad (178.9)$$

З виразу (178.9) випливає, що

$$\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}\vec{H}] = 0 \quad (178.10)$$

або

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} [\vec{v}\vec{H}]. \quad (178.11)$$

Отже, електричне поле в системі координат, пов'язаній з «елементом рідини» або «з «рідкими частинками», дорівнює нулю.

З іншої сторони, якщо розглянути магнітний потік Φ через поверхню, що спирається на замкнутий контур L , проведений у плазмі, то цей магнітний потік може змінюватись або за рахунок зміни напруженості магнітного поля з часом, або за рахунок зміни контуру, кожен елемент якого рухається з локальною швидкістю $\vec{v}$ плазми. Швидкість зміни Φ за рахунок руху контуру визначається виразом

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) = \oint_L B_n |[\vec{v} d\vec{l}]|, \quad (178.12)$$

де $[\vec{v}d\vec{l}] = d\vec{S}$ - елемент площі, що описується елементом контуру $d\vec{l}$ під час його руху зі швидкістю $\vec{v}$, а n - нормаль до $d\vec{S}$.

Враховуючи деякі перетворення вираз (178.12) можна представити так:

$$\frac{d\Phi}{dt} = - \int_S \text{rot}_n(c\vec{E} + [\vec{v}\vec{B}])dS. \quad (178.13)$$

Права частина виразу (178.13) буде дорівнювати нулю, якщо враховувати рівність

$$\text{rot}\left(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v}\vec{B}]\right) = 0. \quad (178.14)$$

Тоді, відповідно до формули (178.13), маємо

$$\Phi = \text{const}. \quad (178.15)$$

Тобто відповідно до закону електромагнітної індукції нулю буде дорівнювати і зміна магнітного потоку, який пронизує довільний рідкий контур. А це означає, що магнітні силові лінії наче приклеєні до речовини, переносяться разом з нею (так звана «вмороженість» магнітного поля).

Отже, так як перетин ліній індукції магнітного поля призводить до виникнення ЕРС індукції, то «вмороженість» магнітного поля означає, що заряджені частинки ідеально проходять плазму рухаючись вздовж ліній індукції магнітного поля. Оскільки провідність плазми скінчена, то виявляється можливим повільний рух плазми перпендикулярно до ліній індукції магнітного поля. Ослаблення магнітного потоку можна оцінити з часом.

Оскільки векторний добуток $[\vec{v}\vec{H}]$ у формулі (178.11) залежить від компоненти швидкості, перпендикулярної до магнітного поля $\vec{H}$. Тому (178.11) можна записати у вигляді

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}[\vec{v}_\perp\vec{H}], \quad (178.16)$$

оскільки результат від цього не змінюється.

Після деяких перетворень отримаємо значення $\vec{v}_\perp$:

$$\vec{v}_\perp = c \frac{[\vec{E}\vec{H}]}{H^2}. \quad (178.17)$$

Отже, в схрещених електричному і магнітному полях ідеально провідна рідина повинна рухатись із швидкістю, яка визначається формулою (178.17). Такий рух називається *дрейфом*, а швидкість - *дрейфовою швидкістю*.

Таким чином, у наших наближених розрахунках вважали електропровідність плазми $\sigma \rightarrow \infty$, тобто нехтували її електричним опором, тому таке наближення називається *дрейфовим*.

Якщо у виразі (178.17) величина векторного добутку $[\vec{E}\vec{H}]$ залежить тільки від компоненти електричного поля, перпендикулярної до магнітного, то можна записати

$$\vec{v}_{\perp} = c \frac{[\vec{E}_{\perp}\vec{H}]}{H^2}. \quad (178.18)$$

Оскільки складова електричного поля E_n паралельна до магнітного поля, то вона не впливає на величину дрейфу плазми поперек поля. Тому вона викликає струм, який протікає вздовж магнітного поля і величина дрейфової швидкості буде мати вигляд:

$$v_{\perp} = c \frac{E_{\perp}}{H}. \quad (178.19)$$

Зауваження: користування виразом дрейфової швидкості у векторній формі треба тільки для того, щоб визначити її напрям за заданих напрямів електричного і магнітного полів.

§179. Плазмовий стан речовини в природі

Переведення нейтрального газу у стан плазми здійснюється внаслідок іонізації атомів або молекул. Енергія іонізації, необхідна для відриву електронів від атомів чи молекул, надається *термічно, електронним або іонним ударом, опроміненням, фотоіонізацією (фотоефектом)* та іншими шляхами. Максимальні енергії іонізації мають інертні гази, а мінімальні - лужні елементи.

Під час термічної іонізації робота іонізації здійснюється за рахунок енергії теплового руху частинок. У земних умовах помітна термічна іонізація може відбуватися в полум'ї, особливо за наявності домішок лужних елементів. В космічних умовах термічно іонізована плазма реалізується у зірках. У природі з термічної плазми складаються зорі, але в лабораторних умовах термічна плазма майже не використовується через труднощі її добування.

Іонізація електронним ударом здійснюється лавиноподібно в електричному газовому розряді (блискавка, електрична іскра, електрична дуга, газосвітні лампи тощо), коли електричне поле надає електрону на довжині вільного пробігу енергію, що перевищує енергію іонізації.

Поряд з процесами іонізації в плазмі завжди відбуваються зворотні їм процеси *рекомбінації* різнойменного заряджених частинок

(електронів та іонів). Процеси рекомбінації в іонізованому газі відбуваються безперервно. Тому, щоб плазма могла існувати довгочасно, процеси іонізації повинні відбуватися безперервно.

Фотоіонізація має значення тільки в дуже розрідженому газі (іоносфера тощо), оскільки за більш-менш помітної густини газу зіткнення між частинками мають більш істотне значення. Тому найбільш поширеним способом добування плазми для наукових і технічних потреб є різні види електричного розряду в газах. Фотоіонізація має важливе значення для астрофізичних процесів. Випромінювання зірок викликає іонізацію газових туманностей та міжзоряного газу, який є розрідженою плазмою з однозарядних іонів водню та електронів. Випромінювання Сонця іонізує верхні шари атмосфери Землі, утворюючи іоносферу.

Сонце складається в основному з майже повністю іонізованого водню. У шарі завтовшки близько 1000 км на відстані порядку 700000 км від центру Сонця знаходиться фотосфера з температурою ~ 6000 К, де водень іонізований значно слабше, ніж у інших областях Сонця. Рух сонячної плазми у сильних магнітних полях призводить до зернистої структури фотосфери, появи сонячних плям та інших нестационарних процесів.

Поблизу Землі плазма захоплюється магнітним полем Землі та утворює радіаційні пояси, схематично показані на рисунку 199. Внутрішній пояс 1 знаходиться на відстані від 500 км до кількох тисяч кілометрів, а зовнішній пояс 2 - на відстані 10000-15000 км від Землі поверхні.

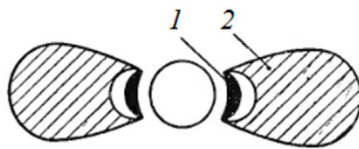


Рис. 199

Крім цих основних способів утворення плазми, існує ще ряд способів, які мають більш вузьке значення. Так, у пошуках способів добування термоядерної плазми вивчається *метод інжекції* (впорскування): розігнані в прискорювачі до великих швидкостей газові іони впорскуються в магнітний уловлювач, притягуючи до себе з навколишнього середовища електрони і утворюють гарячу плазму.

§180. Фізика плазми та перспективи її застосування

Фізика плазми - розділ фізики, що вивчає властивості і поведінку плазми, зокрема, в магнітних полях. Перші дослідження з фізики плазми з'явилися на початку минулого століття, а термін

«плазма» як фізичне поняття запропонував основоположник науки про плазму американський вчений Ірвін Ленгмюр лише в 1923 р. для позначення газу, який має хорошу електропровідність і власне свічення незалежно від його температури.

У 1929 р. Ленгмюр дав кількісний критерій цього поняття. Приблизно в 1950 р. плазма привертала до себе увагу фізиків насамперед як дуже своєрідний провідник і одночасно як джерело світла. Саме з цими властивостями плазми були пов'язані її практичні застосування в газорозрядній і світловій техніці.

До середини минулого століття фізика плазми розвивалась досить повільно і не на магістральних напрямках сучасної науки. Проте в 50-х роках минулого століття інтерес учених до плазми зріс у зв'язку з новими проблемами астрофізики, особливо з появою ідеї про керовану термоядерну реакцію. Тоді фізика плазми почала інтенсивно розвиватись, і нині вона перетворилась в одну з провідних галузей сучасної науки.

Оскільки мова йде про макроскопічну поведінку частково або повністю іонізованого суцільного середовища, фізику плазми можна вважати і підрозділом фізики суцільних середовищ. Основні напрями дослідження:

- стійкість плазми в зовнішніх полях;
- хвилі в плазмі;
- електричні, магнітні та оптичні властивості плазми;
- дифузія, провідність та інші кінетичні явища в плазмі;
- динаміка плазми з магнітним полем, що «вморожене» в плазму (магнітогідродинаміка);
- плазма в космосі (іоносфера, структура зірок, плазма в міжзоряному і міжгалактичному просторі);
- утримання плазми в магнітних пастках;
- керований термоядерний синтез.

В Україні фізикою плазми займаються зокрема на кафедрі квантової теорії поля Київського національного університету імені Т.Г. Шевченка.

Лекція 50. ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА І ФІЗИЧНА КАРТИНА СВІТУ. МЕТОДОЛОГІЯ ФІЗИКИ

§181. Завдання, предмет і методи теоретичної фізики.

Структура фізичної теорії.

§182. Роль експерименту в теоретичній фізиці. Фундаментальні фізичні сталі.

§183. Фізична картина світу та її особливості.

§184. Світоглядне значення курсу теоретичної фізики.

[Габович О., Кузнецов В. Теоретична фізика. Велика українська енциклопедія. URL: [https://vue.gov.ua/Теоретична фізика](https://vue.gov.ua/Теоретична_фізика)]

§181. Завдання, предмет і методи теоретичної фізики. **Структура фізичної теорії**

Теоретична фізика - це один із розділів фізики, який пояснює явища природи математичними методами й несуперечливими раціональними або інтуїтивними міркуваннями, розроблює якісні та кількісні моделі фізичних реалій, передбачає нові явища та пропонує способи їх спостереження.

Предметом дослідження теоретичної фізики є пояснення природних явищ за допомогою математичних методів на основі створення якісних та кількісних моделей фізичних реалій.

Результатами теоретичної фізики є знання про зв'язки між вимірюваними фізичними величинами та їхніми розрахованими кількісними значеннями. Описує різні рівні природи від макроскопічного до мікроскопічного.

Метою теоретичної фізики є дослідження форм матерії, їх атрибутів та причин виникнення, розробка та пояснення фізичної картини світу на різних рівнях її складності.

Розрізняють класичну та некласичну теоретичну фізику:

- *класична теоретична фізика* - описує макросвіт, враховуючи неперервність та абсолютність;

- *некласична теоретична фізика* - наука, яка ґрунтується на квантових, релятивістських і квантово-релятивістських теоріях для опису мікросвіту.

Взаємозв'язок між класичною та некласичною теоретичною фізикою служить способом організації знань та підходів, але обидва напрями спільно працюють для вирішення різноманітних завдань та питань, що стосуються природи та її законів.

Так, виправдано відзначити, що розвиток теоретичної фізики тісно пов'язаний не тільки з науковими дослідженнями, але і з трансформаціями суспільства та культурними впливами. Великі наукові школи та різні національні підходи до теоретичної фізики

допомагають у формуванні різних перспектив та наукових традицій. Серед таких національних підходів та наукових шкіл можна виділити наступні:

1. *Німецький підхід*: Німеччина відома своєю науковою традицією, включаючи в себе відомі наукові школи. Школа А. Зоммерфельда була важливим центром теоретичної фізики у Німеччині, в якій працювали видатні фізики.

2. *Французький підхід*: Франція також має свої внески у теоретичну фізику. Видатні французькі фізики і математики часто визначали ключові напрями дослідження.

3. *Англо-саксонський підхід*: англomовний світ, зокрема Велика Британія та Сполучені Штати, має великий внесок у розвиток теоретичної фізики. Великі університети та дослідницькі центри здійснюють важливі вклади в цю область.

4. *Школа Ландау в СРСР*: Л. Ландау та його школа в СРСР відіграли визначальну роль у розвитку теоретичної фізики. Ця школа відома своєю глибокою інтелектуальною та теоретичною спадщиною.

5. *Школа Пригожина в Бельгії*: Школа І. Пригожина в Бельгії відзначилася у галузі статистичної механіки та нелінійної динаміки, сприяючи розвитку сучасних теоретичних концепцій.

Ці різні школи та підходи внесли свій вклад у формування та розвиток теоретичної фізики як наукової дисципліни. Вони позначилися на культурному та інтелектуальному рівні своїх національних наукових спільнот, а їхні ідеї та теорії долучилися до загального розвитку знань у світовому науковому співтоваристві.

Самі розділи теоретичної фізики є взаємопов'язаними і формують єдину науку. Вони вивчають різні аспекти природи, починаючи від макроскопічних об'єктів і закінчуючи мікроскопічним рівнем елементарних частинок.

Теоретична фізика ґрунтується на фундаментальних принципах симетрії простору і часу. Ці принципи визначають основні властивості природи, які вивчаються в межах різних розділів фізики.

Важливими чинниками теоретичної фізики є закони збереження. Так, наприклад, закон збереження і перетворення енергії звертає увагу на те, що енергія не може бути створена або знищена, а тільки перетворена з одного виду в інший.

Серед методів дослідження теоретичної фізики виділимо науковий. Основою наукового методу є взаємозв'язок теорії та експерименту. Науковий метод, сформульований А. Ньютоном,

включає етапи формулювання гіпотез, проведення експериментів, аналіз результатів, формулювання та модифікацію теорій для пояснення спостережень. З часом науковий метод почав розгалужуватися і вдосконалюватися. Складовими частинами наукового методу стали теорія подібності, уявний та комп'ютерний експерименти.

Використання теорії подібності дало можливість дослідникам використовувати результати одного експерименту для пояснення подібних явищ в інших умовах, що в свою чергу спростило та розширило застосування наукового методу.

Щодо використання уявного експерименту, то це дає можливість вченим використовувати уявні сценарії та логіку для визначення наслідків або взаємодій, які можуть бути складними або неможливими у відтворенні в реальних умовах.

Важливе значення сьогодення становить використання комп'ютерів та комп'ютерної техніки для створення віртуальних моделей те експериментів, що дає можливість вченим вивчати складні системи, моделювати процеси та розвивати нові теорії.

Застосування розширеного наукового методу призвело до створення нових галузей сучасної науки, таких як комп'ютерна наука, теорія хаосу, кібернетика тощо. Всі ці аспекти дозволяють науці ефективніше досліджувати, пояснювати та прогнозувати природні явища, враховуючи різні методи та підходи до вивчення навколишнього світу.

У процесі виникнення, використання та розвитку кожний постулат теорії завжди перевіряється експериментом і, в свою чергу, спонукає експериментаторів до проведення нових досліджень.

Принципи теоретичної фізики є основою експериментальної фізики та решти наук про природу, забезпечують науковість підходів і плідність практичних застосувань фундаментальної науки.

Завдяки розробленим науковим методам створено нові технології, на яких базується сучасна промисловість. Знайдено пояснення стабільності атомів, макроскопічних квантових явищ надпровідності та надплинності. Таким чином, зроблені відкриття і явища є фундаментальними для розуміння природи та її поведінки на макро- та мікроскопічних рівнях.

Усі ці відкриття експериментальної фізики згодом отримали теоретичну інтерпретацію, що забезпечувало й забезпечує подальший науковий прогрес. Загальна ідея полягає в тому, що теоретична

фізика глибоко вивчає природу, надаючи нам розуміння явищ у Всесвіті через математичні моделі та логічні розв'язки.

Теоретична фізика є фундаментом знань про характер фізичних явищ та процесів. Вона не тільки узагальнює експериментальні дані, а й формулює постулати і принципи, створює теорії.

Отже, теоретична фізика - це узагальнення експериментів загальної фізики, побудова відповідних теорій, встановлення зв'язків між фактами, на основі яких застосовували методи дедукції і індукції, зробити нові відкриття. Це вища форма мислення.

Фізична теорія - це відносно замкнена система понять, яка в узагальненій формі представляє нам сукупність даних експерименту, встановлює зв'язки між ними у формі законів, передбачає нові явища.

Тому важливо, що теорія дає можливість не тільки пояснити процеси і явища, але і передбачити їх хід, встановити нові закономірності. Отже, об'єднання матеріалу навколо фізичних теорій дає можливість передати здобувачам освіти не тільки певну суму знань, а й сформувати у них уміння використовувати ці знання для пояснення і передбачення явищ.

Крім того, так як фізичні теорії входять у фізичну картину світу, така система знань сприяє формуванню цілісного уявлення про фізичну картину світу і науковий світогляд.

Структура фізичної теорії складається із 4-х компонентів: основа, ядро, наслідки, висновки (інтерпретація) (табл. 19).

Таблиця 19

Основа	Ядро	Наслідки	Висновки (Інтерпретація)
Емпіричний базис. Ідеалізований об'єкт. Величини. Правила дій над величинами.	Система рівнянь. Закони збереження. Принципи і постулати. Фундаментальні постійні.	Пояснення явищ. Практичне використання. Виведення наслідків. Передбачення явищ.	Тлумачення основних понять і законів. Осмислення границь використання.

Якщо порівняно недавно матеріал об'єднувався за класами явищ: механічні, теплові, електричні, магнітні, світлові, тяжіння тощо, то зараз навчальний матеріал курсу фізики явно об'єднується у фундаментальні теорії:

1. Класична механіка;
2. Електродинаміка і спеціальна теорія відносності;
3. Квантова механіка;
4. Статистична фізика і термодинаміка;
5. Ядерна фізика;
6. Електронна теорія речовини.

Порівнюючи структуру теорії з циклом пізнання в освітньому процесі, можна сказати, що основа теорії відповідає першому етапу пізнання - «факти»; ядро - другому етапу («модель-гіпотеза»); наслідки - третьому етапі (сходження від абстрактного до конкретного); висновки - четвертому етапу (граничі застосування), після чого цикл завершується поверненням до предметно-матеріального світу фізичних об'єктів у практичних застосуваннях («експеримент»).

Таким чином, *узагальнення на рівні теорії* розгортається у відповідності з циклом пізнання і відрізняються від узагальнень на рівні понять і законів *об'ємом*.

§182. Роль експерименту в теоретичній фізиці. Фундаментальні фізичні сталі

Теоретичні концепції створюються для пояснення спостережень, а експерименти проводяться для перевірки та валідності цих теорій. Результати експериментів та нові теоретичні напрацювання взаємодіють, сприяючи розвитку науки. Відкриття нових явищ та подальше розуміння природи відбувається завдяки взаємодії. Такий підхід дає можливість науці розвиватися та адаптуватися до нових відкриттів, створюючи багатосторонню та комплексну картину природи.

Питання про роль експерименту в фізиці, здавалося б, дуже просте, і ні у кого не викликає сумнівів, що експеримент є фундаментом, на якому побудовані всі наші уявлення про структуру оточуючого нас світу. Однак, питання це не таке просте, якщо розглядати його з точки зору вічного протиріччя між теоретиками і експериментаторами з приводу того, що важливіше: теорія чи експеримент.

Перш за все уточнимо, що мається на увазі, коли мова йде про теорію і експеримент. Згідно деяких енциклопедичних словників, *експеримент* - це чуттєво-предметна діяльність в науці, а *теорія* - це система основних ідей в тій чи іншій галузі знання, причому

практика, тобто експеримент, є критерієм істинності і основою розвитку теорії.

Теоретики і експериментатори, тісно співпрацюючи один з одним, відкрили цілий світ елементарних частинок, про існування яких 130 років тому вчені навіть не здогадувалися. Більше 100 років тому, наприкінці XIX ст., були відкриті електрон і радіоактивність атомів. До цього вважалося, що атоми неподільні. Однак те, як влаштовані атоми, залишалося незрозумілим. Тільки після дослідів з розсіювання альфа-частинок на атомах золота, проведених Резерфордом в 1912 р. стало очевидно, що в центрі атома знаходиться масивне позитивно заряджене ядро, розміром в десятки тисяч разів меншим, ніж розмір атома. Спроба пояснити будову атомів була зроблена Н. Бором, що сформулював постулати, згідно з якими електрони в атомах можуть рухатися навколо ядра тільки за фіксованими орбітами. Але модель Бора залишала без пояснення питання, чому електрони не падають на ядро через електромагнітне випромінювання.

Тільки після створення квантової хвильової механіки вдалося сформулювати теорію, яка послідовно і з високою точністю описує будову атомів. Квантова механіка з її незвичними з точки зору класичної фізики уявленнями про хвильову природу руху частинок, в тому числі точкових, була врешті-решт визнана правильною, так як її і тільки її передбачення відповідали результатам великої кількості експериментів. Для опису руху частинок квантова механіка використовує комплексні хвильові функції, без яких не вдається описати, наприклад, проходження точкового об'єкта, що падає на непрозорий екран з двома щілинами так, як ніби він проходить через обидві щілини одночасно. (Відкриття нейтрона - ядро складається з протонів і нейтронів, які пов'язані між собою; теорія бета-розпаду тощо). Незважаючи на те, що квантова механіка продемонструвала свою здатність розраховувати процеси, які відбуваються в мікросвіті, відчуття нерозуміння внутрішніх основ цієї загадкової теорії залишається. Головний параметр теорії - постійна Планка - досі відомий тільки з експерименту.

Які теорії виявляться істинними, може сказати тільки дослід. Так завжди було і так буде. Скільки часу може зайняти створення єдиної теорії матерії, сказати важко, легше передбачити, скільки часу буде потрібно на будівництво конкретних, гігантських за старими мірками, установок. Можливо, вдасться знайти і вивчити за допомогою

методик, що розвиваються в даний час темну матерію у Всесвіті.

Фундаментальні фізичні сталі - постійні величини, що входять в рівняння, які описують фундаментальні закони природи і властивості матерії. Вони характеризують не окремі тіла, а фізичні властивості нашого світу в цілому. Фундаментальні фізичні константи використовують у теоретичній фізиці під час математичного опису навколишнього світу. Часто сюди також відносять і деякі інші фізичні сталі, так чи інакше пов'язані з конкретними тілами, наприклад, (табл. 20).

Таблиця 20

Величина	Символ	Значення в системі СІ	Примітки
Швидкість світла	c	$299792458 \frac{\text{м}}{\text{с}}$	точно
Гравітаційна стала	G	$6,67428(67) \cdot 10^{-11} \frac{\text{м}^3}{\text{кг} \cdot \text{с}^2}$	а (абсолютна величина)
Стала Планка (елементарний квант дії)	h	$6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$	точно
Елементарний заряд	e	$1,602176634 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$	точно

Слово «стала» у фізиці вживається в двоякому сенсі:

- чисельне значення деякої величини взагалі не залежить від будь-яких зовнішніх параметрів і не змінюється з часом;
- зміна числового значення деякої величини несуттєва для даної задачі.

Більшість фізичних сталих розмірні величини, тільки деякі з них безрозмірні. Числове значення розмірної величини залежить від вибору одиниць вимірювання. Проте числове значення безрозмірних констант є фундаментальніше, оскільки воно не залежить від вибору системи одиниць.

§183. Фізична картина світу та її особливості

Важливою особливістю є те, що фізична картина світу постійно еволюціонує і змінюється в результаті нових відкриттів та збагачення знань. Теоретична фізика вносить свій вклад у цей розвиток, розробляючи моделі та теорії, які пояснюють нові явища та спостереження. Це підтримує динамічний характер розвитку науки та розширення нашого розуміння природи.

Теоретична фізика, існуючи як важлива галузь науки, не

обмежується вивченням лише фізичних явищ, але також концептуалізує і розширює своє поле дослідження на більш складні форми матерії, такі як хімічні та біологічні системи. Такий підхід свідчить про те, що теоретична фізика взаємодіє з іншими галузями науки, сприяючи їхньому розвитку та розумінню. А саме:

1. Теоретична астрофізика:

- вивчення фізичних процесів у космосі та великих масштабах, використовуючи принципи теоретичної фізики;

- моделювання великих космічних структур, гравітаційних взаємодій та еволюцій Всесвіту.

2. Теоретична хімія:

- вирішення проблем та розвиток теорій, пов'язаних із хімічними процесами та властивостями речовин;

- дослідження квантово-хімічних аспектів взаємодій молекул та атомів.

3. Теоретична біологія:

- використання теоретичних фізичних принципів для пояснення біологічних явищ та систем;

- моделювання динаміки живих систем, еволюції та взаємодій біомолекул.

Цей підхід підкреслює універсальність принципів теоретичної фізики та їхню здатність розвиватися із зростанням наукового розуміння світу.

Зрозуміло, що неможливо розглядати деякі явища хімічного і біологічного характеру, не спираючись на основні закономірності і теорії фізики. Таке об'єднання наук природничого циклу дає можливість формувати єдину сучасну наукову картину світу. Оскільки фізика вивчає найбільш прості і найбільш загальні рухи матерії, які лежать в основі більш складних рухів, що вивчаються в хімії і біології, то ядром єдиної сучасної наукової картини світу є фізична картина світу. Виходячи із вищесказаного, бачимо, що сучасна наукова картина світу формується не тільки на заняттях з теоретичної фізики, а й на основі синтезу, систематизації та цілісності знань з хімії, біології та інших наук природничого циклу. Поєднання знань природничо-наукового спрямування в єдине ціле дає можливість розглядати прояви матерії та її руху як у живій, так і в неживій природі.

Під *науковою картинною світу* (НКС) розуміють цілісну систему знань про загальні властивості та закономірності природи,

техніки, суспільства і людини, що виникає в результаті узагальнення та синтезу основних знань, отриманих усіма науками на певному етапі розвитку людства. Серед структурних компонентів виділяються наукові поняття, закони, принципи, теорії, а головною характеристикою НКС вважається її системність і інтегрованість.

Аналізуючи праці науковців, можна зазначити, що сучасна наукова картина світу (СНКС) (рис. 200) складається з природничо-наукової (ПНКС), соціально-гуманітарної (СГКС) та інформаційної (ІКС) картин світу. Загальноприйнятим є поділ ПНКС на фізичну (ФКС), хімічну (ХКС) та біологічну (БКС) картину. Отже, складові сучасної наукової картини світу та етапи їх розвитку представлені на рисунку 200.

Важливими компонентами понятійної структури ФКС є:

- вихідні філософські ідеї й уявлення про матерію, простір і час, рух і взаємодію;
- фізичні теорії і закони, а також система фундаментальних фізичних ідей і принципів, що виражають взаємозв'язок між фізичними теоріями.



Рис. 200

Усі ці компоненти реалізувалися протягом еволюції трьох фізичних картин світу:

- механічної (МКС);
- електродинамічної (ЕДКС);
- квантово-польової (КПКС).

ПНКС розглядається як така, що складається з ФКС, БКС і ХКС, котрі є її основними рівнозначними складовими, що описують, відповідно, світи неживої і живої природи. БКС спирається на вихідні філософські категорії, що є загальними для всіх галузей знань. Тому у біологічній картині світу конкретизуються філософські уявлення про матерію та її рух, простір та час, взаємозв'язок і взаємозумовленість явищ природи, взаємодію як загальний атрибут матерії і джерело форм руху матерії.

Науковці виділяють такі складові БКС:

- філософські категорії;
- теорії та закони біологічної науки або теоретичні узагальнення з їх характеристиками (система положень та принципів, понятійний апарат, емпіричний базис тощо);
- система методологічних принципів, що виражає взаємозв'язок між теоріями.

Окрім головних складових БКС, звертає увагу на компоненти біологічної теорії:

- основа;
- ядро;
- наслідки;
- додатки.

М. Сидорович, О. Садохін, В. Данілова, М. Кожевнікова та ін. зазначають, що ядром БКС є теоретичні біологічні системні знання, що ґрунтуються на емпіричних знаннях, сприяють усвідомленню природничо-наукових закономірностей як системотвірних чинників зв'язків понять, поясненню явищ живої природи і розвитку теоретичного мислення.

У поглядах на ХКС науковці поділяють думку про те, що це є вищий рівень актуального хімічного знання і особлива форма його систематизації. Науковці зазначають, що у визначених межах відбувається синтез найбільш істотного природничо-наукового і філософського знання, необхідного для формування наукового світогляду. Відповідно до думки вчених, хімічна картина світу базується на основі вчення про склад речовини (структурної хімії), вчення про хімічні процеси (еволюційної хімії).

У зміст хімічної картини світу входять такі концептуальні

знання:

- теоретичні основи хімії (будова атома, вчення про хімічний зв'язок, каталіз, реакційна здатність речовини тощо);
- будова матеріального світу з боку його хімічного складу, походження основних видів і форм речовини, його хімічна структура;
- природні процеси хімічного руху; розвиток матеріального світу в плані його хімічної еволюції.

Посилаючись на аналіз праць учених, можна сказати, що в основу ПНКС покладені теоретичні знання (фізичні, біологічні, хімічні), які складають фундамент сучасної наукової картини світу та мають важливий світоглядний аспект. Ці знання дають можливість стверджувати науково-раціональне відношення до дійсності, сприймати цілісність живої і неживої природи, розуміти зміст і можливості сучасних методів наукового пізнання та вміння їх застосовувати у професійній діяльності. Отже, можна стверджувати, що ПНКС виконує такі функції, як освітня, світоглядна та формування наукового стилю мислення.

Теоретична фізика має надзвичайно велике загальнонаукове значення як одна із галузей інтелектуальної діяльності людини, що формує сучасне світосприйняття і світорозуміння. Маючи спільні об'єкти і методи дослідження з іншими природничими науками, такими, як біофізика, молекулярна біологія, фізична хімія, хімічна фізика, хімічна термодинаміка тощо, вона стала їх основою.

§184. Світоглядне значення курсу теоретичної фізики

Вивчення теоретичної фізики сприяє створенню наукового світогляду, формує образ мислення майбутнього педагога. Курс теоретичної фізики покликаний формувати цілісне бачення світу, сприяти інтегруванню інших навчальних курсів. Курс теоретичної фізики також знайомить здобувачів освіти з математичними методами досліджень та математичним апаратом, який використовується для розв'язування конкретних фізичних задач. Він також створює теоретичну базу для навчання фізики в середній школі.

Під *світоглядом* розуміють узагальнюючу систему поглядів людини на світ у цілому, на місце окремих явищ у світі і на своє власне місце в ньому, розуміння й емоційна оцінка людиною сенсу її діяльності і долі людства, сукупність наукових, філософських, політичних, правових, моральних, релігійних, естетичних переконань

та ідеалів людей.

Теоретична фізика відіграє особливу роль у підготовці здобувачів освіти як у плані формування певного рівня фізико-технічної культури, так і в плані наукового світогляду, розуміння сутності практичної спрямованості фізики, оволодіння методами фізичного моделювання тощо. Тоді вони повинні відчувати реальність явищ, законів, процесів, освоїти методи сучасного фізичного експерименту, що є дуже важливим для розуміння сучасної теоретичної фізики.

Теоретична фізика для здобувачів освіти педагогічних університетів є не лише джерелом пізнання нового, а й предметом багатосторонніх зв'язків з дійсністю: природою, людьми, різними науками, що з нею пов'язані. Вона є засобом розширення їх природничо-наукового світогляду. У процесі навчання вони мають оволодіти загальнокультурними і професійними компетенціями з фізики, до яких, у першу чергу, слід віднести: готовність використовувати основні фізичні закони, теорії, проводити експерименти, застосовувати фізичні методи у природничих дослідженнях.

Теоретична фізика як навчальна дисципліна сприяє розвитку природничо-наукового світогляду. Крім того, курс теоретичної фізики органічно включає питання не тільки сучасної науки, але й питання з дослідження природознавства, що надає йому фахового спрямування. Враховуючи специфіку підготовки здобувачів закладів вищої освіти (ЗВО) курс також повинен бути наповнений практичним та прикладним матеріалом міждисциплінарного змісту.

Фундаментальні фізичні теорії в курсі теоретичної фізики є не тільки засобами підвищення природничо-наукового рівня курсу фізики, але й засобами формування кінцевого результату навчання, систематизації навчального матеріалу, розвитку пізнавального інтересу, формування мотиваційної сфери, природничо-наукового мислення і світогляду. У навчальному курсі теоретичної фізики використовується багато спільного фундаментального матеріалу, який дає основу для реалізації міждисциплінарних зв'язків, для синтезу знань, які засвоюються здобувачами освіти на заняттях і можуть бути застосовані у дисциплінах хімічного і біологічного циклу. Тобто вивчення теоретичної фізики має велике значення для формування світоглядних уявлень про явища, що відбуваються в природі, тобто для вироблення наукового світогляду.

Для підтримки цього питання повинен існувати точний у науковому і методологічному плані виклад основ теоретичної фізики з наголосом на світоглядному боці кожного питання курсу. Формування природничо-наукового світогляду у здобувачів має важливе значення у теоретичній фізиці. Головною умовою природничо-наукового світогляду є систематизація фундаментальних теорій курсу теоретичної фізики, хімічних та біологічних дисциплін, принципів глобального еволюціонізму, самоорганізації і саморозвитку та уявлень про єдину картину світу в освітньому просторі.

Науковий світогляд здобувачів освіти формується тоді, коли вивчення курсу спирається на їх знання, здобуті в школі у процесі вивчення фізики, хімії, біології та інших наук. Важливе значення у формуванні природничо-наукового світогляду має курс філософії. Оволодівши певними знаннями філософських понять та ідей, вони з упевненістю можуть пов'язувати їх зі структурою фізичної науки, закономірностями її розвитку, методами фізичних досліджень тощо. Поєднання курсу теоретичної фізики з основними філософськими поняттями та ідеями викликане сучасним станом та розвитком фізичної науки.

Для підведення здобувачів освіти до формування питань світоглядного характеру важливу роль відіграє викладач фізики. Викладач повинен, по-перше, сам вільно володіти відповідним світоглядним багажем; по-друге, мати на озброєнні спеціальні методики, що дозволяють формувати науково-природничий світогляд засобами дисципліни; по-третє, необхідна наявність засобів дисципліни (завдання, задачі, питання тощо), головною метою яких є формування науково-природничого світогляду.

Елементи історизму в курсі теоретичної фізики відіграють особливе значення для формування природничо-наукового світогляду, тому що історія фізики володіє багатим матеріалом у цій галузі. Історичні факти можна використовувати не тільки під час проведення лекційних занять, але і на практичних заняттях під час розв'язування задач та під час розгляду та опису досліджень. Важливе значення для формування природничо-наукового світогляду мають питання про межі застосування законів, які здобувачі освіти встановлюють на основі модельних обрахунків та вимірювань. На таких заняттях здобувачам можна дати уявлення про формування природничо-наукового світогляду, зокрема розуміння ними меж

застосування фізичних законів, взаємозв'язку і взаємозалежності теорії та практики.

Деякі дидакти і методисти зазначають, що проблемні питання на заняттях також наштовхують здобувачів освіти на формування природничо-наукових світоглядних знань. До таких проблемних питань належать передусім ті, які вимагають розкриття світоглядного аспекту переходу від теоретичної класичної фізики до сучасної, подолання протиріч, що виникають у теорії фізики.

Отже, формування природничо-наукового світогляду здобувачів освіти здійснюється на основі глибокого аналізу взаємозв'язку теоретичної фізики та дисциплін хімічного та біологічного циклу. Особливо, необхідно звернути увагу на:

- узагальнення знань здобувачів освіти, отриманих ними під час вивчення як курсів теоретичної фізики так і курсів хімічного і біологічного спрямування;

- єдність фундаментальних законів природи та розкривати їх роль під час пояснення фізичних, хімічних і біологічних явищ і фактів, що вивчаються в курсі теоретичної фізики;

- заняттях необхідно завжди в цікавій і доступній формі з позицій сучасної теоретичної фізики розповідати про внутрішню єдність фізичних, хімічних і біологічних знань та їх значення для суспільного розвитку.

ПИТАННЯ ДЛЯ КОНТРОЛЮ ТА ПЕРЕВІРКИ ЗНАНЬ З ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕОРІЇ РЕЧОВИНИ

1. Предмет і завдання електронної теорії речовини.
2. Історія розвитку вчення про електронну теорію речовини.
3. Методи дослідження електронної теорії речовини.
4. Типи зв'язків атомів в твердих тілах.
5. Іонні кристали.
6. Ковалентні зв'язки.
7. Металічні кристали.
8. Молекулярні кристали.
9. Кристали з водневими зв'язками.
10. Геометрія кристалічної ґратки.
11. Просторова ґратка.
12. Перетворення симетрії.
13. Кристалічні системи (сигнолії).

14. Кристалічні індекси (індекси Міллера).
15. Зонна структура енергетичного спектру носіїв заряду кристалів.
16. Метали.
17. Діелектрики.
18. Напівпровідники.
19. Рівняння Шредінгера для кристалу.
20. Адіабатичне наближення.
21. Одноелектронне наближення.
22. Метод ефективної маси.
23. Квазіімпульс.
24. Причини введення квазіімпульсу.
25. Обернена ґратка.
26. Зони Бріллюена.
27. Коливання простої одновимірної ґратки.
28. Коливання складної одновимірної ґратки.
29. Акустичні та оптичні коливання.
30. Нормальні координати для простої одновимірної ґратки.
31. Коливання тривимірної ґратки.
32. Фонони.
33. Дисперсія фононів і її дослідження за допомогою розсіювання нейтронів.
34. Електрон-фононна взаємодія.
35. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Ейнштейном).
36. Квантова теорія теплоємності твердих тіл (за Дебаєм).
37. Магнітні характеристики середовища.
38. Діамагнетизм.
39. Діамагнетизм Ландау.
40. Парамагнетизм іонів, атомів і молекул.
41. Спіновий парамагнетизм Паулі.
42. Феромагнетизм.
43. Температура Кюрі.
44. Обмінна природа феромагнетизму.
45. Лазери.
46. Гелій-неоновий лазер.
47. Хімічні лазери.
48. Напівпровідникові лазери.
49. Надпровідність.
50. Високотемпературна надпровідність.

51. Ефект Мейснера.
52. Квантова рідина.
53. Надтекучість рідкого гелію.
54. Надплинність.
55. Основні характеристики плазми.
56. Електричне поле в плазмі.
57. Плазма в магнітному полі.
58. Плазмовий стан речовини в природі.
59. Фізика плазми та перспективи її застосування.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА З ЕЛЕКТРОННОЇ ТЕОРІЇ РЕЧОВИНИ

Електронна теорія речовини

1. Альперін М.М., Клубіс Я.Д., Брюханов А.О. Електронна теорія будови речовини: Навчальний посібник. Одеса: Друк, 2007. 200 с.
2. Електронна теорія речовини. (Конспект лекцій): Посібник для студентів вищих навчальних педагогічних закладів освіти. / Автори-укладачі: А.Ф. Недибалюк, В.І. Солоненко, А.М. Сільвейстр. Вінниця: ТОВ Фірма «Планер», 2007. 68 с.
3. Курта С.А. Будова речовини: Навчально-методичний посібник. Івано-Франківськ: ВДВ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2007. 162 с.
4. Мазуренко Д.М. Електронна теорія речовин: Підручник для фізмат ф-тів пед. ін-тів УРСР. К.: Вища школа, 1969. 176 с.
5. Третьак О.В., Лозовський В.З. Основи фізики напівпровідників: Підручник: У 2 т. К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2007. Т. 1. 338 с.

Предметний покажчик

α -розпад радіоактивний 288, 290

β -розпад радіоактивний 292

π -мезони віртуальні 363

адрони 358

ансамбль Гіббса великий канонічний
42

ансамбль Гіббса канонічний 42

ансамбль мікроканонічний 37

ансамбль статистичний (фазовий)
27

баріони 357

Бозе-концепція 234

Бозе-рідина 464

бозони 216, 222, 227, 356

будова атомного ядра 274

величина випадкова дискретна 51

величина дисперсії
середньоквадратичної (відносної)
253

величини макроскопічні 30

взаємодії Вігнера 314

взаємодії нуклонні 310

взаємодії фундаментальні 270

взаємодія гравітаційна 271

взаємодія диполь-дипольна або
міжмолекулярна 393

взаємодія електромагнітна 270

взаємодія електрон-фононна 431

взаємодія сильна 271

взаємодія слабка 272

випромінювання вимушене 453

випромінювання рівноважне як
ідеальний газ фотонів 237

випромінювання спонтанне 453

виродження в квантовій системі
230

вихід ядерної реакції 327

вихор квантовий 383

відношення гіромагнітне 444

газ бозонний 234

газ електронів провідності 236

газ електронний 236

газ ідеальний 18

газ ідеальний вироджений
(квантовий) 214, 232

газ ідеальний невироджений 232

газ ідеальний сильно вироджений
(сильно квантовий) 232

газ одноатомний класичний 152

газ реальний 179

газ слабо неідеальний 181

гелікон 386

генератор квантовий 453

геометрія кристалічної ґратки 394

гідродинаміка магнітна 472

гіперзаряд 362

гіперони 357

гіпотеза Бора про незалежність
розпаду компаунд-ядра від
способу його одержання 329

графік функції розподілу Бозе-
Ейнштейна 227

група перетворень симетрії 396

групи точкові 396

густина ймовірності 143

ґратка Браве 397

ґратка обернена 411

ґратка просторова 394

двигун вічний першого роду 68

двигун вічний другого роду 84

двигуни внутрішнього згорання
поршневі 93

дейтрон 306

дефект мас 281

дивність 362

дисперсія фононів 429

діамагнетизм Ландау 447

діамагнетики 444

діелектрики 402

довжина хвилі де Бройля 273
 домен 380
 домішки воднеподібні 411
 дослід Штерна 137
 досліді Ламмерта 136
 досліді Мозлі 277
 дрейф 473
 експеримент 481
 електрони локалізовані 382
 електрони нелокалізовані
 (делокалізовані) 382
 електропровідність 466
 елемент симетрії 396
 енергія Фермі 237
 енергія активації 339
 енергія атомна 334
 енергія Ван дер Ваальса 393
 енергія вільна 109
 енергія внутрішня 109
 енергія зв'язку 281
 енергія зв'язку питома 281
 енергія порогова 324
 енергія системи вільна 56
 енергія системи внутрішня 66
 енергія хімічного зв'язку 390
 енергія ядерна ділення 334
 ентальпія 111
 ентропія 55, 72, 73, 101
 ефект де Гааза-ван Альфена 387
 ефект діамантний 445
 ефект Зеебека 377
 ефект ізотопічний 383
 ефект Мейснера 461
 ефект Мессбауера 299
 ефект механокалоричний 387
 ефект Пельтьє 378
 закон виробництва ентропії 262
 закон Відемана-Франца 378
 закон дисперсії 409
 закон дисперсії фононів 430
 закон Дюлонга і Пті 435, 436, 441
 закон збереження баріонного заряду
 359

закон збереження дивності
 частинок 362
 закон збереження електричного
 заряду в електродинаміці 32
 закон збереження і перетворення
 енергії у перетворенні
 елементарних частинок 359
 закон збереження ізотопічного спіну
 362
 закон збереження імпульсу у
 перетворенні елементарних
 частинок 359
 закон збереження лептонного
 заряду 360
 закон збереження моменту імпульсу
 у перетворенні елементарних
 частинок 359
 закон зміцнення Віна 241
 закон зростання ентропії 75
 закон Кюри-Вейсса 452
 закон радіоактивного розпаду 286
 закон Релея-Джінса 237
 закон Стефана-Больцмана 243
 закон термодинаміки для
 елементарних процесів перший 67
 закон термодинаміки для замкнених
 процесів другий 73
 закон термодинаміки для замкнених
 процесів перший 68
 закон термодинаміки для
 квазістатичних процесів другий
 71, 72
 закон термодинаміки для
 нестатичних процесів другий 79
 закон термодинаміки для
 нестатичних процесів і
 неізольованих систем другий 81
 закон термодинаміки для скінченних
 процесів другий 73
 закон термодинаміки для
 скінченного процесу перший 67
 закон термодинаміки третій 115
 закон Фур'є 259
 залежність активаційна або

арфеніусівська 199
 заряд баріонний 359
 заряд електричний 356
 заряд лептонний 359
 значення енергії власні
 одночастинкові 214
 значення мікроскопічних величин
 усереднені 61
 значення середнє за великим
 канонічним ансамблем 49
 значення середнє кінетичної енергії
 154
 значення функції Гамільтона середнє
 40
 зона Бріллюена 412, 425
 зона Бріллюена перша або основа
 412
 зона Бріллюена приведена 413
 зона валентності 401
 зона провідності 401

ізобарами 280
 ізотони 281
 ізотопи 280
 індекси кристалографічні (Міллера)
 398
 інтеграл повної енергії системи 36
 інтеграл системи статистичний 45
 інтеграл статистичний в
 квазікласичному наближенні 53
 інтеграл статистичний для
 реальних газів 179, 180
 інтеграли Пуассона 128
 інтеграли руху 34
 інтенсивність критична 347

ймовірність термодинамічна стану
 термодинамічної рівноваги 56
 йонізація 474

картина світу біологічна 485
 картина світу електродинамічна
 485
 картина світу інформаційна 485
 картина світу квантово-польова

485
 картина світу механічна 485
 картина світу наукова 484
 картина світу природничо-наукова
 485
 картина світу соціального-
 гуманітарна 485
 картина світу сучасна наукова 484
 картина світу фізична 485
 картина світу хімічна 485
 катастрофа ультрафіолетова 241
 квазіімпульс 408
 квантування енергії 163
 квантування фазового простору 49
 кварки 367
 кварки верхні 368
 кварки нижні 368
 кількість теплоти 65
 ККД теплової машини термічний 92,
 96
 ККД циклу Карно 88
 класифікація ядерних реакцій 324
 коефіцієнт дифузії 260
 коефіцієнт йонізації 467
 коефіцієнт перетворення 93
 коефіцієнт розмноження нейтронів
 346
 коефіцієнт теплового розширення
 119
 коефіцієнт теплопровідності 260
 коефіцієнти кінетичні 261
 коливання акустичні 420
 коливання оптичні 420, 422
 коливання простої одномірної
 ґратки 413
 коливання складної одномірної
 ґратки 417
 коливання тривимірної ґратки 424
 комірка Вігнера-Зейтца 394
 компаунд-ядро 329
 континуум коливань 437
 конфайнмент 369
 координати нормальні 422, 424
 крива рівноваги фаз 198
 кристали з водневими зв'язками 393

кристали з гомеополярними зв'язками 390
кристали з ковалентними зв'язками 390
кристали іонні 390
кристали металічні 391
кристали молекулярні (Ван дер Ваальсівські) 392
критерій Лоусона 353
критика теорії теплової смерті Всесвіту 89

лазер 453
лазер гелій-неоновий 457
лазер напівпровідниковий 459
лазер хімічний 458
лептони 357

магнітогідродинаміка 472
маса атомного ядра 278
маса власна 356
маса елементарних частинок 356
маса критична 347
маса невласна 356
масштаб розділення просторовий 467

машина тепла 91
машина холодильна 93
мезони 357
мета теоретичної фізики 477
метали 401
метастабільні стани збудженого ядра 298
метод ефективної маси 387, 407
метод магнітної нейтронографії 387
метод спостереження затухання крутильних коливань маятника 387
метод статистичний 21
метод термодинамічний 21
методи вивчення макроскопічних властивостей речовини 387
методи визначення вигляду фермі-поверхні 387

методи для інверсії заселення в газовому лазері 388
методи дослідження електронної теорії речовини 386
методи дослідження кристалів 386
методи дослідження плазми 388
методи електронного парамагнітного резонансу 387
методи отримання керованої термоядерної реакції 388
мікростани безмежно близькі 24
мікростани нерівноважні 250
мікростани рівноважні 250
модель ядерних оболонок 320
модель ядра краплинна 315, 316
модель ядра оболонкова 319
модуль канонічного розподілу 44

наближення адіабатичне 405
наближення гармонічні 414
наближення одноелектронне 406
наближення парних зіткнень 181
наближення парної взаємодії 181
надрівідність 460
надрівідність високотемпературна 461
надтекучість 464
намагніченість тіла 443
напівпровідники 402, 403
наслідки другого закону термодинаміки фізичні 83
наслідки теореми Нернста 116
недосяжність абсолютного нуля 118
нейтрони миттєві або вторинні 343
нерівність Кірквуда-Онсагера 466
нерівність Клаузіуса 82
нерозпізнаність квантова 52

об'єм фазового простору 25
область розмиття ферміївського розподілу 227
означення ентропії статистичне 75
оператор Лапласа 274
опис макроскопічний 22
опис мікроскопічний 23

осцилятор лінійний гармонічний 427
 пара електронів куперівська 461
 парамагнетизм 448
 парамагнетизм спіновий Паулі 450
 парамагнетик 452
 параметр системи
 термодинамічний або
 макроскопічний 18
 параметр удару 310
 параметри макроскопічні внутрішні
 22
 параметри макроскопічні зовнішні
 22
 параметри системи зовнішні 58
 параметри термодинамічні
 адитивні 18
 параметри термодинамічні
 інтенсивні 18
 параметри термодинамічні
 рівноважні 58
 парність процесів 297
 переріз ефективний ядерних реакцій
 326
 перетворення симетрії 394
 переходи фазові 1-го роду 205
 переходи фазові 2-го роду 206
 плазма гаряча 466
 плазма 465, 468
 плазма високотемпературна 466,
 467
 плазма ізотермічна 465
 плазма неізотермічна 465
 плазма низькотемпературна 466
 плазма холодна 465
 площина симетрії даного тіла 395
 поле електричне в плазмі 468
 поняття температури 97
 поріг ділення 339
 постулат рівноймовірності станів
 38
 постулат рівноймовірності станів
 термодинамічної рівноваги 37
 потенціал Гіббса термодинамічний
 110, 192, 194

потенціал Гіббса термодинамічний
 великий 115
 потенціал електрохімічний 231
 потенціал системи хімічний 213
 потенціал хімічний 114
 правило Бора-Уйлера 341
 правило фаз Гіббса 203
 предмет дослідження теоретичної
 фізики 477
 принцип Больцмана 244, 246
 принцип Ле-Шательє 198
 принцип Паулі 217
 природа феромагнетизму обмінна
 452
 проникливість магнітна 444
 простір фазовий 24
 процес елементарний 61, 64
 процеси замкнуті 67
 процеси квазістатичні (рівноважні)
 69
 процеси колові (цикли) 88
 процеси необоротні 70, 79
 процеси оборотні 70, 79
 радіус ларморівський 471
 радіус Томаса-Фермі 470
 реактор (котел) ядерний 347
 реактори брідерні 347
 реакції злиття (синтезу)
 термоядерні 349, 350
 реакції термоядерні 334
 реакції термоядерні 350
 реакції термоядерні керовані 351
 реакції ядерні 321, 323
 реакція Конрофта і Уолтона 324
 реакція ланцюгова керована 347
 реакція ланцюгова ядерна 344, 346
 реакція ядерна екзотермічна 324
 реакція ядерна ендотермічна 324
 резонанс 358
 резонанс ядерний магнітний 319
 рекомбінація 474
 рівень Фермі 227
 рівновага трьох фаз 200
 рівняння Бертоло 191

рівняння Больцмана кінетичне 254
 рівняння Дітерічі 191
 рівняння Еренфеста 207
 рівняння Клапейрона 122
 рівняння Клапейрона-Клаузіуса 197, 198
 рівняння Клаузіуса 191
 рівняння Лондонів 462
 рівняння Менделєєва-Клапейрона 122, 123
 рівняння Пуассона 469
 рівняння реального газу Ван дер Ваальса 188, 189
 рівняння рівноважної статистичної термодинаміки основне 57
 рівняння Роберта Майєра 158, 159
 рівняння стану 107
 рівняння стану ідеального газу 123
 рівняння стану системи 63
 рівняння стану термічне 120
 рівняння трансцендентне 241
 рівняння фазової траєкторії параметричні 26
 рівняння Шредінгера 207, 274, 409
 рівняння Шредінгера для кристалу 403
 рідина квантова 463
 робота 64, 65
 робота процесу максимальна 89
 розмір ядра 283
 розміри атомних ядер 276
 розміри критичні 347
 розподіл Бозе-Ейнштейна 223, 227
 розподіл Бозе-Ейнштейна для фотонів 238
 розподіл Больцмана 143
 розподіл Гауса 245
 розподіл Гіббса в напівпровідниках 228
 розподіл Гіббса великий канонічний 47
 розподіл Гіббса із змінним числом частинок 229
 розподіл Гіббса канонічний 41, 57, 58
 розподіл Гіббса канонічний в

квантовій статистиці 51
 розподіл Гіббса канонічний для ідеального газу 218
 розподіл Гіббса канонічний квантовий 209
 розподіл Гіббса квантовий великий канонічний 212, 219
 розподіл Гіббса квантовий канонічний 52
 розподіл класичний 232
 розподіл Максвелла 125
 розподіл Максвелла за модулем імпульсу 132
 розподіл Максвелла за модулем імпульсу рівноважного газу 133
 розподіл Максвелла за модулем швидкості 133
 розподіл Максвелла за проекцією імпульсу молекули 129
 розподіл Максвелла за проекціями імпульсу молекул рівноважного газу 128, 129
 розподіл Максвелла за проекціями швидкості молекул рівноважного газу 131
 розподіл Максвелла-Больцмана 140, 143
 розподіл мікроканонічний 38
 розподіл мікроканонічний в квантовій статистичній фізиці 208
 розподіл мікроканонічний нормований 39
 розподіл молекул газу за модулем їх імпульсу (швидкості) 131
 розподіл молекул газу за проекціями їх імпульсу (швидкості) 126
 розподіл молекул ідеального газу за координатами 143
 розподіл молекул ідеального газу за швидкостями та координатами 138
 розподіл Планка 242
 розподіл Фермі-Дірака 222, 224, 237
 розподіли квантові 232

розрахунок теплоємності 171
розсіювання непружне 322
розсіювання пружне 322

світлодіод 459
світгляд 487
світгляд науковий 489
сила Лоренца 470
сила узагальнена 61
сили Барлета 314
сили Гейзенберга 313
сили Майорана 313
сили ядерні 272, 303
симетрія трансляційна 396
система в термостаті 42
система зі змінним числом частинок 48
система ізольована 37
система макроскопічна 18
система надкритична 346
система підкритична 346
система проста 60, 63
системи багатокомпонентні 203
системи квазінезалежні 43
системи кристалічні (синглії) 397
системи однокомпонентні 203
співвідношення невизначеностей
Гейзенберга 49, 273
спін 356
спін ізотопічний 360
сприйнятливність магнітна 443
стала 483
сталі фізичні фундаментальні 482
стан вікової рівноваги 287
стан електронного газу основний 236
стан макроскопічний 120
стан речовини агрегатний 193
стан термодинамічної рівноваги 18, 250
стани симетричні та антисиметричні 215
статистика Максвелла-Больцмана
класична для ідеального газу 141
статистика Фермі-Дірака 227

ступені вільності внутрішні
(електронні) 170
ступені вільності коливні 169
ступені вільності обертальні 165
ступені вільності поступальні 164
сума статистична 52, 162
сума статистична квантова 52

температура 99
температура абсолютна 100, 101
температура Дебая 440
температура ефективна 393
температура критична 199
температура Кюри 452
температура статистична 103
теорема Блоха 407
теорема Карно 103
теорема Лармора 378, 445
теорема Ліувіля 33
теорема Нернста теплова 115
теорема про рівнорозподіл енергії за
ступенями вільності 149
теорія 481
теорія молекулярно-кінетична
класична 19
теорія парамагнетизму класична 449
теорія твердих тіл зонна 400
теорія теплоємності газів класична 159
теорія теплоємності квантова 162
теорія теплоємності твердих тіл
квантова (за Дебаєм) 437
теорія теплоємності твердих тіл
квантова (за Ейнштейном) 435
теорія фізична 480
теплоємність 155
теплоємність двоатомних газів 160
теплоємність молярна 156
теплоємність одноатомних газів 160
теплоємність питома 156
теплоємність за сталого тиску 157
теплоємність за сталого об'єму 157
теплообмін 65, 66

теплопередача 65, 66
термодинаміка нерівноважних систем 260
термодинаміка статистична 57
термодинамічні функції 123
термостат 42
тип зв'язку водневий 394
тиск критичний 199
тіла тверді 389
токамак 386
тотожність основна термодинамічна 89
точка критична 199
точка потрійна 200
точка фазова 24
траєкторія фазова 26
транзитивність 97
тривалість життя збудженого ядра 298

умова нормування канонічного розподілу Гіббса 210
умова нормування функції розподілу 29
умова стійкості важких ядер 337
умови рівноваги фаз 194

фаза речовини 193
ферміони 216, 222, 224, 356
фермі-рідина 464
ферромагнетизм 451
ферромагнетизм слабкий 380
ферромагнетик 452
фізика плазми 475
фізика статистична 22
фізика теоретична 477
фізика теоретична класична 477
фізика теоретична некласична 477
флуктуації адитивних величин для макроскопічних систем 246
флуктуації основних термодинамічних величин 250
флуктуації за низьких температур 119
флуктуація 244

фонон 428
формула Бальмера 277
формула барометрична 146, 147
формула Боте-Вайцзекера 299
формула Брейта-Вігнера 333
формула Вайцзекера 315
формула Гіббса-Гемгольца 62
формула Ланжевена 379

формула Планка 240
формула Фермі-Дірака 231
функції збудження ядерної реакції 327
функції процесу 66
функції стану 63
функції характеристичні або термодинамічні 107
функція власна одночастинкова 214
функція Гамільтона 424
функція Гамільтона класичного одноатомного газу 152
функція Гамільтона одновимірного лінійного гармонійного осцилятора 154
функція Гауса 307
функція розподілу в фазовому просторі 28
функція розподілу за різними мікростанами системи 29
функція розподілу частинок по станах μ -простору 143
функція розподілу частинок за одночастинковим станом 220
функція хвильова 409
функція хвильова антисиметрична 216
функція хвильова блохівська 408
функція хвильова симетрична 216
функція хвильова системи 207
функція Юкави 307

характеристика рівноважної мікроскопічної системи 101
характеристики нуклонів 274
хвилі циклотронні 386

цикл Дизеля 95
цикл Карно 88, 103
цикл Карно обернений 93
цикл Отто 94
цикл Трінклера 97
цінність внутрішньої енергії 106

час життя частинки 356
час релаксації 69
частота циклічна 471
числа заповнень 217
числа заповнень одночастинкових
станів 218
числа магічні 318
число масове 281
число ступеней вільності 159
число термодинамічних ступенів
вільності 204
швидкість групова 416
швидкість дрейфова 473

швидкість найбільш ймовірна 133
швидкість процесу 69
швидкість релаксації 69
швидкість середня арифметична
134
швидкість середня квадратична 134
швидкість фазова 416
шкала Реомюра 99
шкала температур абсолютна 99
шкала температур абсолютна
термодинамічна 106
шкала Фарангейта 98
шкала Цельсія 98

явища переносу 258
явище електронного парамагнітного
резонансу 379
явище надпровідності 234
ядра магічні 318

НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ

Сільвейстр Анатолій Миколайович
Моклюк Микола Олексійович

ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА

Частина 2

Статистична фізика і термодинаміка
Ядерна фізика
Електронна теорія речовини

Курс лекцій

для здобувачів освіти фізико-математичних факультетів
педагогічних закладів вищої освіти

Рекомендовано до друку Вченою радою Вінницького державного
педагогічного університету імені Михайла Коцюбинського.
(Протокол № 8 від 24.01.2024 року).

Підписано до друку 11.06.2024.

Формат 64х90/16. Папір офсетний.

Друк цифровий. Гарнітура Times New Roman.

Ум. друк. арк. 31,50. Обл.-вид. арк. 29,29.

Наклад 300 прим. Зам. № 4097.

Віддруковано з оригіналів замовника.

ФОП Корзун Д.Ю.

Видавець ТОВ «Твори»

Свідectво про внесення суб'єкта видавничої справи до
Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів

Видавничої продукції серія ДК № 6188 від 18.05.2018 р.

21027, а/с 8825, м. Вінниця, вул. Немирівське шосе, 62а.

Тел.: +38(096) 973 09 34, + 38(093) 891 38 52.

E-mail: info@tvoru.com.ua, <http://www.tvoru.com.ua>