

~~İmzalı kitabı qəbul edildiy.~~

TERMODİNAMİKA

VƏ

STATİSTİK FİZİKA

Ali məktəblər üçün dərslik

*Azərbaycan Respublikası Təhsil
Nazirliyin 11 aprel 2003-cü il tarixli
273 sayılı əmri ilə təsdiq edilmişdir*

Bakı Universiteti nəşriyyatı

Bakı - 2005

**Kitaba rəy verənlər: 1. Azərbaycan MEA-nın akademiki,
prof. F.M.HƏŞİMZADƏ**

536
293

**2. Azərbaycan MEA-nın müxbir üzvü,
prof. A.İ.MUXTAROV**

B.M.Əsgərov

Termodynamika və statistik fizika. Ali məktəblər üçün dərslik. Bakı Universiteti nəşriyyatı, Bakı. 2005, 625 s., şəkilli.

Oxuculara təqdim olunan bu kitab müəllifin Bakı Dövlət Universitetinin fizika fakültəsində otuz beş ildən artıq müddətdə oxuduğu mühazirə kursunun əsasında yazılmışdır. Burada termodynamika və statistik fizika bir-birindən ayrı, müstəqil bölmələr kimi deyil, əksinə, onlar müasir proqrama uyğun olaraq six əlaqədə bütöv bir kurs kimi şərh edilir.

Dərslikdə termodynamik funksiyalar və potensiallar metodu ilə Gibbsin statistik metodu əsas yer tutur. Burada göstərilmişdir ki, Gibbs metodu əsasında sistemin sərbəst enerjisi tapılarsa, onda hal tənliyini, entropiyani və bütün termodynamik əmsalları hesablamaq olar. Bundan əlavə, kitabda kvant statistikasının şərhinə geniş yer verilmişdir. Bu bölmədə klassik statistikanın çətinliklərinin necə aradan qaldırılması göstərilmişdir.

Kitab Universitetlərin fizika fakültələrinin yuxarı kurs bakalavriatlari, magistrantlar və aspirantlar üçün nəzərdə tutulmuşdur. Eyni zamanda kitabın bəzi fəsilləri elmi işçilər üçün də faydalı ola bilər.

Ə $\frac{1604030000 - 07}{658(07) - 0100} - 2005$

© Əsgərov Bəhrəm Mehrəli oğlu

ÖN SÖZ

Termodinamika və statistik fizika (statistik mexanika) çoxlu sayıda zərrəciklərdən ibarət makroskopik sistemlərin – cisimlərin *termodinamik tarazlıq* halında fiziki xassələrini (mexaniki, istilik, maqnit, optik, elektrik, kinetik və s. xassələri) öyrənir. Göründüyü kimi həm termodinamikanın, həm də statistik fizikanın tədqiqat məsələləri və obyekti eynidir. Lakin makroskopik sistemləri öyrənmə üsulları (metodları) müxtəlifdir.

Termodinamika – *fenomenoloji nəzəriyyədir*. O fiziki hadisələrin mexanizmi, yəni bu hadisələrlə sistemin daxili quruluşu arasındaki əlaqə ilə maraqlanmadan cisimlərin xassələrini təcrübi nəticələri ümumiləşdirmə yolu ilə səthi öyrənir. Belə ümumiləşdirmənin nəticəsində termodinamikanın postulatları və qanunları meydana çıxmışdır. Bu qanunlar makroskopik sistemlərin müxtəlif xassələri və onlarda baş verən ayrı-ayrı fiziki hadisələr (effektlər) arasında ümumi əlaqələr tapmağa imkan verir.

Statistik fizika – *mikroskopik nəzəriyyədir*. O makroskopik sistemlərin hansı zərrəciklərdən ibarət olmasını, bu zərrəciklərin qarşıılıqlı təsirinin təbiətini, onların hərəkət qanunlarını bilərək, yəni maddənin quruluşu haqqında qurulmuş müəyyən model əsasında cisimlərin təcrübədə müşahidə olunan xassələrini izah edir və ya onların yeni xassələrini qabaqcadan xəbər verir. Statistik fizika klassik və ya kvant mexanikası və ehtimal nəzəriyyəsi əsasında makroskopik sistemlərin fiziki xassələri üçün *keyfiyyətcə yeni - statistik qanuna uyğunluqlar* tapır, termodinamikanın qanunlarını əsaslandırır, onların tətbiq

olunma hüdudlarını müəyyən edir, habelə termodinamik kəmiyyətləri statistik izah etməyə və onların orta qiymətlərini hesablamağa imkan verir.

Yuxarıda deyilənlərdən aydın olur ki, cisimlərin fiziki xassələrinin termodinamik və ya statistik öyrənmə metodlarının hər birinin üstün və çatışmayan cəhətləri var.

Fenomenoloji termodinamikadan çıxan nəticələr ümumi xarakter daşıyır və istənilən makroskopik sisteme tətbiq oluna bilər, lakin bu zaman müşahidə olunan fiziki hadisələrin və xassələrin daxili mexanizmi açılmır. Başqa sözlə, termodinamika hadisələri və onlar arasında olan əlaqələri təsvir edir, lakin nə üçün belədir sualına cavab vermir.

Statistik fizika isə cisimlərin xassələrini onun daxili quruluşu ilə əlaqələndirir, fiziki hadisələrin mikroskopik nəzəriyyəsini yaradır və nə üçün belədir sualına cavab verir. Bu metodun çatışmayan cəhəti ondan ibarətdir ki, burada alınan nəticələr xüsusi xarakter daşıyır və yalnız baxılan model çərçivəsində düzgündür.

Termodinamika və statistik fizika sistemləri yalnız tarazlıq halında deyil, həm də sistemdə müəyyən cəreyanlar (elektrik yükü, enerji və maddə axını) mövcud olduğu halda da onları öyrənir. Bu halda nəzəriyyələr, uyğun olaraq, *qeyri-tarazlıq halının termodinamikası* və ya *kinetika* adlanır. Kinetika öz başlangıcını Bolsmanın kinetik tənliyindən (1872) götürür və indiki zamanda da inkişaf etməkdədir.

Fenomenoloji termodinamikanın inkişafı on doqquzuncu yüzilliyin birinci yarısında başlamışdır. Termodinamikanın birinci qanunu alman fizioloqu və həkimi Robert Mayer (1842) və ingilis fiziki Ceyms Coul (1843) tərəfindən müəyyən edilmişdir. Onlar istiliyin və mexaniki işin ekvivalent olduğunu göstərmişlər və birinci qanuna belə tərifmişlər: *əgər sistem qapalı termodinamik tsikldə iştirak edib ilkin halına qayidarsa, onda bütün tsikl zamanı sistemə verilən istilik miqdarı onun*

gördüyü ekvivalent işə bərabərdir. Göründüyü kimi, termodinamikanın birinci qanunu enerjinin saxlanması qanunudur. İstənilən qapalı olmayan termodinamik proses üçün bu saxlanma qanununu alman fiziki və fizioloqu Herman Helmhols (1847) ümumiləşdirmiştir.

Termodinamikanın ikinci qanunu alman fiziki Rudolf Klauzius (1850) və ondan asılı olmadan ingilis fiziki V.Kelvin tərəfindən tapılmışdır. Onlar, yalnız statistik mənası olan yeni hal funksiyası – *entropiya* anlayışını nəzəriyyəyə daxil etmiş və sistem termodinamik tarazlığa yaxınlaşarkən onun *entropiyasının monoton artması* qanununu (termodinamikanın ikinci qanunu) kəşf etmişlər.

Mütəq temperatur sıfra yaxınlaşdıqca bütün sistemlərin entropiyasının sıfra getdiyini - yəni termodinamikanın üçüncü qanunu Nernst (1906) müəyyən etmişdir.

Qeyd edək ki, termodinamikanın birinci qanunu *enerji* haqqında, ikinci və üçüncü qanunları isə *entropiya* haqqında qanunlardır.

Bələliklə, termodinamikanın əsas yaradıcıları Mayer, Coul, Helmhols, Klauzius, Kelvin və Nernst olmuşdur.

Bizi əhatə edən bütün cisimlərin bölünməz zərrəciklərdən – atomlardan ibarət olması ideyasının hələ bizim eradan dörd əsr əvvəl qədim yunan filosofları Demokrit və Levkipp tərəfindən söylənməsinə baxmayaraq statistik fizika yalnız ondoqquzuncu yüzilliyin ortalarında inkişafa başlamışdır. Bu inkişafın əsası Rudolf Klauzius, Ceyms Klark Maksvell və Lyudviq Bolsmanın işlərində qoyulmuşdur. Bu elm korifeyləri materiyanın molekulyar kinetik nəzəriyyəsini yaratmışlar.

Görkəmli alman fiziki Rudolf Klauzius «İstilik adlanan hərəkətin təbiəti haqqında» (1857) adlı məqaləsində göstərmüşdür ki, istilik enerjisi hərəkət edən molekulların kinetik enerjisidir. Başqa bir işində (1859) R.Klauzius molekulların sərbəst yolunun uzunluğunu anlayışını daxil etmiş, bununla da

qazlarda istilik keçirmənin və daxili sürtünmənin mexanizminin təhlilini vermişdir. Məhz bu işlərə görə Uillard Gibbs (amerika fiziki) R.Klauziusu «Statistik mexanikanın atası» adlandırmışdır.

Həmin bu illərdə talantlı ingilis fiziki Ceyms Klark Maksvell Kral cəmiyyətində etdiyi məruzədə (1859) özünün məşhur molekulların sürətlərə görə paylanması vermişdir. Sonralar (1868-1871) bu paylanma avstriya fiziki Lyudviq Bolsmanın işlərində ideal qaz xarici sahədə olduğu hal üçün ümumiləşdirilmişdir. Bolsmanın bu paylanma funksiyası fizikanın müxtəlif məsələlərinin həllində geniş istifadə edilir. Statistik fizikanın inkişafında çox böyük rol oynamış kinetik enerjinin sərbəstlik dərəcələrinə görə bərabər paylanması teoremini də Bolsman isbat etmişdir.

Lakin L.Bolsmanın statistik fizikanın inkişafındakı ən böyük xidməti onun nəzəriyyəyə qeyri-tarazlılıq paylanması funksiyası anlayışını daxil etməsi və bu funksiya üçün tənliyi – *Bolsmanın kinetik tənliyini* (1872) çıxarması olmuşdur. Qazlar üçün yazılmış bu tənlik hal-hazırda metallarda və yarımkəçiricilərdə kinetik effektlərin öyrənməsi üçün ən əsas nəzəri metoddur. Bu tənlikdən xüsusi halda – tarazlıq halında, molekulların sürətlərə görə Maksvell paylanması funksiyası alınır.

Kinetik tənlikdən istifadə edərək Bolsman özünün məşhur *H*-teoremini isbat etmişdir. Bu teoremə görə paylanması funksiyasından elə bir *H*-kəmiyyəti düzəltmək olar ki, bu kəmiyyət zamandan asılı olaraq yalnız monoton azala bilər: $dH/dt \leq 0$. Bu teoremə Bolsman özü termodinamikanın ikinci qanununun (entropiyanın artması qanunu) əsaslandırılması kimi baxırıdı, çünkü *H* funksiyası Bolsmana görə müəyyən şəkildə sistemin entropiyası ilə əlaqədardır.

Mexanikanın qanunlarının zamana görə dönen olması ilə *H*-teorem arasında ziddiyyət görən bəzi fiziklər Bolsmanın bu ideyasına etiraz edirdilər. Belə tənqidlər bir də ona görə

ciddiləşirdi ki, bir çox nüfuzlu fiziklər və kimyaçılar (E.Max, V.Ostvald) atomların mövcud olmasına, bununla da molekulyar-kinetik nəzəriyyəyə, ümumiyyətlə, şübhə edirdilər. Lakin 1908-ci ildə fransız fiziki Jan Perren broun hərəkətini tədqiq edərkən atomların mövcud olduğunu təcrübə olaraq isbat etdi və ilk dəfə onların mütləq çekisini (kütləsini $\sim 10^{-24} \div 10^{-22}$ g) təyin etdi. Bununla da Bolsmanın molekulyar-kinetik nəzəriyyəsi təcrübə təsdiqini tapmış oldu.

Statistik fizikanın zirvəsini amerikan fiziki Uillard Gibbs yaratmışdır (1902). O, elə bir metod vermişdir ki, bu metodun köməyi ilə sistemin sərbəst enerjisini, tam enerjisini, hal tənliyini və başqa termodinamik parametrlərini hesablamaq mümkündür. Bunun üçün sistemin enerjisinin onu təşkil edən zərrəciklərin koordinat və impulsundan asılılığını, kvant sistemləri halında isə enerji spektrini (enerjinin kvant ədədlərindən asılılığını) bilmək kifayətdir.

Beləliklə, klassik statistik fizikanın əsasını Klauzius, Maksvell, Bolsman və Gibbs qoymuşlar.

Qeyd etmək lazımdır ki, klassik statistikanın bir çox məsələlərə tətbiqi təcrübə faktlarla düz gəlməyen nəticələr veririd. Belə məsələlərdən qara cismin şüalanması (foton qazının termodinamikası), metalların istilik tutumu, Pauli paramaqnetizmini göstərmək olar. Klassik statistikanın bu çətinlikləri yalnız kvant mexanikası (de-Broyl, Heyzenberq, Şredinger, Dirak) meydana gəldikdən və onun əsasında kvant statistikası (Fermi-Dirak, Boze-Eynsteyn) yarandıqdan sonra aradan qalxmışdır (1924-1926).

Oxuculara təqdim olunan bu kitab müəllifin Bakı Dövlət Universitetinin fizika fakültəsində otuz beş ildən artıq müdəddətde oxuduğu mühazirə kursunun əsasında yazılmışdır. Burada termodinamika və statistik fizika bir-birindən ayrı, müstəqil bölmələr kimi deyil, əksinə onlar müasir proqrama uyğun olaraq sıx əlaqədə bütöv bir kurs kimi şərh edilir.

Kitabda termodinamik funksiyalar və potensiallar metodu ilə Gibbsin statistik metodu əsas yer tutur. Burada göstərilmişdir ki, Gibbs metodu əsasında sistemin sərbəst enerjisi tapılarşa, onda hal tənliyini, entropiyani və bütün termodinamik əməsalları hesablamaq olar. Bundan əlavə, kitabda kvant statistikanın şərhinə geniş yer verilmişdir. Bu bölmədə klassik statistikanın çətinliklərinin necə aradan qaldırılması göstərilmişdir.

Kitab doqquz fəsildən və dörd əlavədən ibarətdir. Paraqraflar fəsil daxilində nömrələnmişdir (məsələn, § 5.6 - beşinci fəslin altıncı paraqrafi); düsturlar paraqraf daxilində nömrələnmişdir. Əgər verilən fəsil daxilində düstura istinad edilirsə, yalnız düsturun nömrəsi göstərilir. Əgər başqa fəsilde olan düstura istinad edilirsə, onda düsturun nömrəsinin əvvəlində fəslin nömrəsi əlavə olunur (məsələn, (V.2.4) – beşinci fəsilde (2.4) nömrəli düsturu göstərir). Şəkillər fəsil daxilində nömrələnmişdir. Əgər başqa fəsildəki şəkile müraciət olunursa, onda şəkin nömrəsindən əvvəl fəslin nömrəsi əlavə olunur (məsələn, şəkil V.4 – beşinci fəslin 4-cü şəklini göstərir).

Kitabın yazılması və nəşrə hazırlanması zamanı öz qeydləri və faydalı məsləhətləri ilə onun səviyyəsinin yüksəlməsinə kömək etmiş AMEA-nın akademiki F.M. Həsimzadəyə və AMEA-nın müxbir üzvü A.İ. Muxtarova dərin minnətdarlığını bildirirəm. Dərsliyin tərtibi prosesində bir çox məsələlərin müzakiresində fəal iştiraklarına görə dos. S.Fiqarovaya və f.-r.e.n. M.Mahmudova təşəkkür edirəm. Eyni zamanda, kitabın işıq üzü görməsində əməyi olan hər bir kəsə, o cümlədən kitabın əlyazmasının çapa hazırlanmasında böyük əməyi olmuş Samirə İmaməliyevaya təşəkkür edirəm.

Bütün nəşrlərdə olduğu kimi, bu kitab da nöqsansız deyil. Müəllif oxucular tərəfindən göstərilən iradları və edilən təklifləri böyük razılıq və minnətdarlıqla qəbul etməyə hazırlıdır.

B.M.Əsgərov

I FƏSİL

TERMODİNAMİKA VƏ STATİSTİK FİZİKANIN ƏSAS ANLAYIŞLARI

Bu fəsildə termodinamika və statistik fizikanın əsasını təşkil edən anlayışlar və postulatlar şərh olunmuşdur. Coxlu sayıda hissəciklərdən: atomlardan, molekullardan, ionlardan, elektronlardan, fotonlardan və s. ibarət olan sistemlərin makroskopik və mikroskopik hallarının tərifi verilmişdir. Mikrohallara görə paylanma funksiyası, müəyyən makrohalın statistik çekisi, entropiya, həmçinin temperatur və təzyiq anlayışları daxil edilmişdir.

§1.1. Sistemin makroskopik hali. Termodinamikanın postulatları

Termodinamika və statistik fizika çox sayıda sərbəstlik dərəcəsinə malik olan sistemlərin, yəni makroskopik sistemlərin fiziki xassələrini öyrənir. Bu sistemlərin ölçüləri və yaşama müddəti onların üzərində təcrübə aparmaq üçün kifayət qədər böyük olmalıdır. Belə sistemlərə çox sayıda atom və ya molekullardan ibarət olan adı qaz, foton qazı, plazma, müəyyən həcmi dolduran maye, kristal parçası və s. misal ola bilər. Makroskopik sistemin hissələrinə *altsistemlər* deyilir. Altsistem kiçik ola bilər, lakin makroskopik olmalıdır.

Makroskopik sistemlər bir-biri ilə müxtəlif kanallarla qarşılıqlı təsirdə ola bilərlər. Əgər bir sistem başqa bir sistem

üzərində iş görürsə bu *mekaniki qarşılıqlı təsir* adlanır ($\Delta A \neq 0$). Bu zaman sistemin həcmi dəyişir.

Qarşılıqlı təsir zamanı sistemlərin enerjisi iş görülmədən, yalnız istilik mübadiləsi yolu ilə dəyişirə buna *istilik qarşılıqlı təsir* deyilir ($\Delta Q \neq 0$).

Sistemlər arasında zərrəciklər mübadiləsinə gətirən qarşılıqlı təsir *maddi qarşılıqlı təsir* adlanır ($\Delta N \neq 0$).

Göstərilən qarşılıqlı təsir kanallarının hansının açıq və ya bağlı olmasından asılı olaraq müxtəlif tipli makroskopik sistemlər mövcuddur.

Ətraf mühitlə heç bir qarşılıqlı təsirdə olmayan, yəni nə enerji, nə də maddə mübadiləsi etməyən sistem *tam izolə olunmuş sistem* adlanır: $\Delta A = 0$, $\Delta Q = 0$, $\Delta N = 0$. Belə sistemlər üçün bütün qarşılıqlı təsir kanalları bağlıdır, yəni sistemin enerjisi, həcmi və zərrəciklərin sayı dəyişmir.

Əgər sistem ətraf mühitdən (başqa sistemlərdən) istiliyi keçirməyən divarla əhatə olunmuşsa belə sistem *adiabatik izolə olunmuş sistem* adlanır ($\Delta Q = 0$).

Ətraf mühitlə maddi (hissəcik) mübadiləsi edə bilməyən sistemlərə *qapalı* ($\Delta N = 0$) və eksinə hissəciklərin sayı dəyişə bilən sistemlərə *açıq sistemlər* ($\Delta N \neq 0$) deyilir.

Əgər öyrənilən sistem çox böyük sistemin kiçik, lakin makroskopik hissəsini təşkil edirəsə, onda baxılan sistemdə baş verən proseslər (enerjinin udulması və buraxılması) böyük sistemin halını, demək olar ki, dəyişdirməyəcək. Bu halda böyük sistem *termostat*, onunla qarşılıqlı təsirdə olan kiçik sistem isə *termostatda olan sistem* adlanır.

Verilmiş xarici şəraitdə olan hər bir sistemin halını təcrübədə ölçülə bilən məhdud sayıda fiziki kəmiyyətlərlə təsvir etmək olar. Belə kəmiyyətlər *termodinamik parametrlər* adlanır. Sistemdə olan zərrəciklərin sayı N , sistemin həcmi V , təzyiq P , mütləq temperatur T , dielektrik \mathcal{P} və maqnit M

polyarizasiyası, elektrik \mathcal{E} və maqnit \mathbf{H} sahələrinin gərginlikləri termodinamik parametrlərə misal ola bilər. Bu parametrlər həm sistemin özünü, həm də onun olduğu xarici şəraiti xarakterizə edir.

Oyrənilən sistemlə qarşılıqlı təsirdə olan kənar cisimlərin koordinatları ilə təyin olunan parametrlər *xarici parametrlər* adlanır: qazın həcmi, elektrik və maqnit sahələrinin gərginliyi və s. Sistemə nəzərən xarici cisimlərin koordinatından başqa sistemdəki zərrəciklərin koordinat və impulslarından asılı olan parametrlərə *daxili parametrlər* deyilir: təzyiq, temperatur, daxili enerji, dielektrik polyarizasiyası, maqnitləşmə vektoru və s.

Daxili parametrlər intensiv və ya ekstensiv ola bilər. Sistemdə olan hissəciklərin sayından asılı olmayan parametrlər *intensiv parametrlərdir*: təzyiq, temperatur və s. Sistemdəki hissəciklərin sayına, yəni maddənin miqdarına mütənasib olan kəmiyyətlər isə *ekstensiv* və ya *additiv parametrlər* adlanır: enerji, termodinamik potensiallar və s.

Təcrübədə ölçüle bilən və yuxarıda adları çəkilən termodinamik (makroskopik) parametrlər toplusu ilə təyin olunan hala sistemin *makroskopik halı* deyilir.

$$\text{Makroskopik hal} \Rightarrow (N, V, P, T, \mathcal{P}, \mathbf{M}, \mathcal{E}, \mathbf{H}, \dots)$$

Aydındır ki, makroskopik parametrlər sistemin halını ortalaşmış vəziyyətdə təyin edir, yəni sistemi təşkil edən hissəciklərin mürəkkəb hərəkətinin detalları və təbiəti nəzərə alınmir. Sistemin halının bu cür təsviri fenomenoloji, yəni səthi xarakter daşıyır.

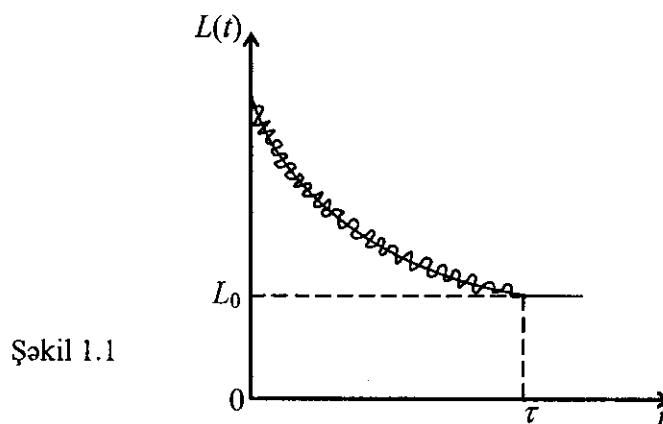
Sistemin makroskopik halını təyin edən termodinamik parametrlər zamandan asılı olaraq dəyişmirlərsə, belə hal *stationar hal* adlanır. Bundan əlavə sistemdə heç bir stasionar axın və ya cərəyan yoxdursa sistemin belə halına *termodinamik tarazlıq hali* deyilir. Bu hal sistemin ən bəsит mək-

roskopik halidir. Qeyd edək ki, bu halda sistemin daxilində hissəciklərin mürekkeb xaotik hərəkəti var, lakin termodynamika bununla maraqlanmır.

İlkin anlayışların tərifini verdikdən sonra termodinamikanın əsasını təşkil edən iki postulatı şərh edək. Bu postulatlar təcrübənin ümumiləşdirilməsi nəticəsində yaranmışdır.

Termodinamikanın birinci postulatı: her bir izolə olunmuş sistemin özünə məxsus müəyyən və yeganə termo-dinamik tarazlıq hali var; əgər izolə olunmuş sistem tarazlıq halında deyilsə, onda zaman keçdikcə sistem mütləq özə termo-dinamik tarazlıq halına gelir və özbaşına (xarici təsir olmadan) hec vaxt bu haldan çıxa bilməz.

Termodinamikanın ümumi prinsipi adlanan bu postulat, ixtiyari makroskopik L parametri timsalında şekil 1.1-de nümayiş etdirilir. $L(t)$ kemiyyətinin özünün tarazlıq halindəki L_0 qiymətinə çatma müddəti τ *relaksasiya müddəti* adlanır. τ -nun qiyməti sistemi təşkil edən hissəciklərin qarşılıqlı təsirinin təbiətindən və hərəkət intensivliyindən asılıdır. Aydındır ki, əgər qeyri tarazlıq qiyməti L tarazlıq qiymətindən azdırsa,



Şekil 1.1

§1.1 Makroskopik hal. Termodinamikanın postulatları

Kəfəf

onda zaman keçdikcə $L(t)$ artar və özünün tarazlıq qiymətinə çatar. Entropiya məhz bu cür kəmiyyətlərdəndir (bax § 1.7).

Birinci postulat termodinamikanın qanunlarının tətbiq olunma hüdudlarından birini təyin edir, yəni sistemi təşkil edən hissəciklərin sayına aşağıdan məhdudiyyət qoyur. Doğrudan da, hər bir sistem arası kəsilmədən hərəkətdə olan hissəciklərdən ibarət olduğundan $L(t)$ parametri özünün orta qiymətindən kənara çıxa bilər, yəni flüktuasiya baş verə bilər. Bu cür kənara çıxmalar sxematik olaraq şəkil 1.1-də göstərilmişdir. Termodinamika bu cür fluktuasiyaları nəzərə almır və yalnız kəmiyyətlərin təcrübədə ölçülən orta qiymətləri ilə maraqlanır. Ona görə də termodinamikanın qanunları yalnız o sistemlərə tətbiq oluna bilər ki, kənara çıxmalar çox kiçik olsun. Bu elə sistemlərdə mümkündür ki, onların təşkil edən hissəciklərin sayı kafayət qədər çox olsun.

Əgər sistemdə olan hissəciklərin sayı az olarsa, onda nisbi flüktuasiya böyük ola bilər və sistem tez-tez özbaşına tarazlıq halından çıxa bilər. Belə olduqda tarazlıq halı anlayışı mənasını itirir və termodinamikanın birinci postulatı pozulur. Bu fikri sadə bir misalda nümayiş etdirmək olar. Qutuda olan N sayda molekuldan ibarət qazın halına baxaq. Xəyalən qutunu iki bərabər hissəyə bölək. Tarazlıq halında qabın hər hissəsində $N/2$ sayda molekul olmalıdır. Əgər $N = 4$ olarsa, onda tez-tez belə hallar müşahidə edə bilərik: birinci hissədə 3 molekul, ikinci hissədə 1 molekul; birinci hissədə 4 molekul, ikinci hissə boş. Belə vəziyyətlər çox böyük nisbi flüktuasiya, yəni sistemin özbaşına tarazlıq halından (qabın hər bölməsində $N/2 = 2$ hissəcik) çıxması deməkdir.

Beləliklə, birinci postulatdan aşağıdakı nəticə çıxır: *termodinamikanın qanunları az sayıda hissəciklərdən ibarət sistemlərə tətbiq oluna bilməz.*

Termodinamikanın ikinci postulatı: əgər iki A və B sistemlərinin hər biri ayrılıqda üçüncü C sistemi ilə termodinamik tarazlıqdadırsa, onda A və B sistemləri öz aralarında tarazlıqdadır, yəni

$$\left. \begin{array}{c} A \sim C \\ B \sim C \end{array} \right\} \Rightarrow A \sim B \quad (1.1)$$

Termodinamikanın sıfırıncı qanunu adlanan bu postulat termodinamik tarazlıq halının tranzitivlik xassəsini ifadə edir.

İkinci postulat termodinamika qanunlarının hansı sistemlərə tətbiq olunmasının yuxarı sərhəddini təyin edir. Bu postulatdan göründüyü kimi A, B, C altsistemlərini istilik kontaklarına getirdikdə və ayırdıqda onların tarazlıq halı dəyişmir, yəni altsistemlərin qarşılıqlı təsir enerjisi nəzərə alınmayaçaq dərəcədə azdır və mürəkkəb sistemin enerjisi additiv kəmiyyətdir: sistemin tam enerjisi E onu təşkil edən altsistemlərin enerjiləri cəminə bərabərdir*).

$$E = \sum_{\alpha} E_{\alpha}, \quad (1.2)$$

burada E_{α} nömrəsi α olan altsistemin enerjisidir.

Beləliklə, yalnız enerjisi additiv olan sistemlərə termodinamikanı tətbiq etmək olar. Additivlik şərti (1.2), qravitasiya sahəsi ilə qarşılıqlı təsirdə olan böyük sistemlər üçün təbiidir ki, ödənmir**) Odur ki, həddindən artıq böyük sistemlərə, məsələn, bütövlükdə kainata termodinamikanın qanunları tətbiq edilə bilməz.

*) (1.2) bərabərliyi fərz edir ki, sistemin alt sistemləri arasındaki qarşılıqlı təsir enerjisi onların öz daxili enerjilərinə nisbətən nəzərə alınmayaçaq dərəcədə kiçikdir.

**) Bu halda sistemin hissələri arasındaki qarşılıqlı təsir enerjisini nəzərə almamaq olmaz.

Enerjinin additivlik prinsipinden başqa ikinci postulatdan daha bir vacib nəticə alınır. Doğrudan da, bu postulatdan çıxır ki, əgər A, B, C termodinamik tarazlıqda olan mürəkkəb sistemin alt sistemləridirsə, onda onların həli verilmiş xarici parametrlərdən başqa hamısı üçün ümumi olan bir daxili parametrə də xarakterizə olunur. Bu daxili intensiv parametr *temperatur* adlanır və termodinamik tarazlıq halında sistemin bütün hissələrində eynidir. Temperatur sistemi təşkil edən hissəciklərinin istilik hərəkətinin intensivliyi ilə təyin olunur. Beləliklə, bu postulata görə sistemin termodinamik tarazlıq həli, xarici parametrlər çoxluğu və temperaturun verilməsi ilə birqiyəməti təyin olunur. Deməli, ikinci postulata görə sistemin termodinamik tarazlıq halını xarakterizə edən *daxili parametrlərin hər biri xarici parametrlərin və temperaturun funksiyasıdır*. Bu nəticə sistemini ixtiyarı A_i daxili parametrini, T temperatur və a_1, a_2, \dots, a_n xarici parametrlərlə əlaqələndirir:

$$A_i = A_i(a_1, a_2, \dots, a_n, T); \quad i = 1, 2, \dots, \kappa, \quad (1.3)$$

burada κ daxili parametrlərin sayıdır. Simvolik şəkildə yazılış bu tənliklərə sistemin *termik hal tənlikləri* deyilir. Belə tənliklərin sayı, aydınlaşdır ki, daxili parametrlərin sayı qədərdir.

Əgər daxili parametr olaraq sistemin tam daxili enerjisini götürsək $A_i \equiv E$, onda (1.3)

$$E = E(a_1, a_2, \dots, a_n, T) \quad (1.4)$$

kimi yazılı bilər. Bu tənlik sistemin *kalorik hal tənliyi* adlanır.

Beləliklə, (1.3) tənliklər çoxluğunundan görünür ki, sistemin termodinamik tarazlıq (makroskopik) həli $(n+1)$ sayda asılı olmayan parametrlərin verilməsi ilə tam təyin olunur. Buna görə də $(n+1)$ ədədi sistemin termodinamik sərbəstlik dərəcəsi adlanır. Sistemin mürəkkəbliyindən və təbiətindən

asılı olaraq $n = 1, 2, 3, \dots$ qiymətlər ala bilər.

Ən sadə halda qapalı sistemlər^{*)} üçün sərbəst dəyişən kimi xarici parametr olaraq V həcmini götürsək, onda daxili parametr olan təzyiq P və daxili enerji E , (1.3) və (1.4) tənliklərinə uyğun olaraq aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$P = P(V, T); \quad E = E(V, T) \quad (1.5)$$

Bu hal tənliklərinin açıq şəkilləri ideal qazlar üçün eksperimentdən tapılmış və statistik metodlarla nəzəri olaraq əsaslandırılmışdır:

$$P = \frac{N}{V} k_0 T; \quad E = \frac{3}{2} k_0 T N \quad (1.6)$$

burada N -ideal qazda olan zərrəciklərin sayı, k_0 -Bolsman sabitiidir.

Temperaturu (1.4) tənliyindən tapıb (1.3) -də yerinə qoysaq, onda bütün daxili parametrləri E və xarici parametrlər a_1, a_2, \dots, a_n vasitəsi ilə ifadə etmək olar. Beləliklə, termodinamikanın ikinci postulatını - belə də ifadə etmək olar: *termodinamik tarazlıq halında sistemin bütün daxili parametrləri xarici parametrlərin və enerjinin funksiyalarıdır*:

$$A_i = A_i(a_1, a_2, \dots, a_n, E). \quad (1.7)$$

Bu şərti ödəyən sistemlərə *erqodik sistemlər* deyilir. Deməli, termodinamika yalnız erqodik sistemləri öyrənir.

Aydındır ki, ideal qaz üçün (1.6)-dan istifadə etsək (1.7) tənliyinin açıq şəkli

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V} \quad (1.8)$$

^{*)} Verilmiş sayda neytral atomlardan və ya moleküllardan təşkil olunmuş qaz belə sistemlərə misal ola bilər.

kimi olar.

Sonda qeyd edək ki, termodinamikanın birinci postulatı *termodinamik tarazlıq*, ikinci postulatı isə *temperatur* anlayışlarını təyin edir.

Eyni zamanda yada salaq ki, termodinamikanın birinci və ikinci qanunları, uyğun olaraq, *daxili enerji* və *entropiya* kimi termodinamik tarazlıq hal funksiyalarını müəyyən edir.

§1.2. Sistemlərin mexaniki təsviri. Mikroskopik hal. Faza fəzəsi. Kvant halları

Məlumdur ki, istənilen makroskopik sistem- cism həd-dən artıq çoxlu, lakin sonlu sayıda zərrəciklərdən ibarətdir. Özü də bu zərrəciklərin hər biri mürəkkəb daxili quruluşa malik ola bilər. Hələlik bizi sistemi təşkil edən hissəciklərin mürəkkəbliyi maraqlandırmayacaq və belə hesab edəcəyik ki, öyrəndiyimiz sistem bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olan və daim hərəkət edən N sayıda zərrəcikdən ibarətdir. Deməli, baxılan sistemin sərbəstlik dərəcələrinin sayı $3N$ -dir. Qeyd edək ki, normal şəraitdə 1sm^3 havada təxminən $3 \cdot 10^{19}$ sayıda molekul var. Hər molekulun xətti ölçüsü 10^{-8} sm tertibindədir. Makroskopik sistemlərdə olan hissəciklərin sayı və ölçüləri haqqında təsəvvür yaratmaq üçün Kelvinin getirdiyi bir misalı yada salaq: bir stəkan suda olan H_2O molekullarının sayı yer üzərindəki okean və dəniz sularının stəkanlarla miqdardından təxminən yüz dəfə çoxdur.

Belə mürəkkəb sistemin təfsilatlı halını bundan əvvəlki paraqrafda adları çəkiliən az sayıda termodinamik parametrlərin verilməsi ilə tam təyin etmək, əlbəttə, mümkün deyil, çünkü belə makroskopik hal öyrənilən cismi daxili quruluşunu nə-zərə almır. Sistemin halını bütün təfsilatı ilə təyin etmək üçün onun hansı zərrəciklərdən ibarət olmasını, bu zərrəciklərin

qarşılıqlı təsirinin təbiətini və onların hərəkətinin hansı tənliklərlə təsvir olunduğunu bilmək lazımdır. Hissəciklərin hərəkəti klassik və ya kvant mexanikasının qanunlarına tabe ola bilər. Buna uyğun olaraq təbiətdə iki cür sistem: klassik və kvant sistemləri mövcuddur. Bu hallara ayrılıqda baxaq.

Klassik sistemlər. Belə sistemləri təşkil edən hissəciklərin hərəkəti klassik mexanikanın qanunlarına tabedir və onların hər birinin t anındakı hali üç ümumiləşmiş $q_i(t)$ koordinatın və impulsun üç uyğun $p_i(t)$ komponentlərinin verilməsi ilə təyin olunur.^{*)} Deməli, N zərrəcikdən ibarət klassik sistemin bütövlükdə t anındakı hali, yəni

$$\text{mikrohal} \Rightarrow (q, p) \equiv (q_1, q_2, \dots, q_{3N}; p_1, p_2, \dots, p_{3N}) \quad (2.1)$$

$6N$ sayda kəmiyyətlərlə təyin olunur.

Beləliklə, $3N$ ümumiləşmiş koordinat və $3N$ ümumiləşmiş impulsun verilməsi ilə təyin olunan hala klassik sistemin *mikroskopik hali* və ya qısaca *mikrohalı* deyilir. İstənilən $q_i(t)$ və $p_i(t)$ kəmiyyətləri, yəni sistemin mikrohalı Hamiltonunun

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}; \quad i = 1, 2, \dots, 3N \quad (2.2)$$

kanonik tənliklər sisteminin həllindən tapılır: burada $3N$ sistemin sərbəstlik dərəcələrinin sayı, \mathcal{H} -sistemin Hamilton funksiyasıdır. Konservativ sistemlər üçün \mathcal{H} -sistemin (2.1)

^{*)} Klassik statistik fizikada hissəciyin hərəkətini onun sürəti ilə deyil impulsu ilə xarakterizə etmək daha münasibdir. Ona görə ki, Liuvill teoremi (bax §1.3) koordinat və sürət (q, \dot{q}) fəzasında deyil, yalnız (q, p) faza fəzasında doğrudur.

mikrohalında olduqda onun tam enerjisi $E(q, p)$ ilə eyni olur:

$$\mathcal{H} \equiv E(q, p) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + U(q_1, q_2, \dots, q_{3N}), \quad (2.3)$$

harada ki, m -zərrəciyin kütlesi, $U(q)$ -onların qarşılıqlı təsirinin potensial enerjisidir; fərz olunur ki, xarici sahə yoxdur; q_i və p_i üzərindəki nöqtə zamana görə törməni göstərir.

Klassik sistemlərin mikrohallarını təsvir etmək üçün *faza fəzası* və ya Γ -fəzası anlayışından istifadə etmək çox əlverişlidir. Hər bir sistemin özünəməxsus faza fəzası var: N zərrəcikdən ibarət klassik sistemin faza fəzası $6N$ ölçülü abstrakt fəzadır ki, onun hər bir nöqtəsinin vəziyyəti $3N$ sayda q_i ümumiləşmiş koordinatın və $3N$ sayda p_i ümumiləşmiş impulsun, yəni $6N$ sayda kəmiyyətin verilməsi ilə təyin olunur.

Beləliklə, N zərrəcikdən ibarət klassik sistemin hər bir mikrohalına $6N$ ölçülü faza fəzasında bir nöqtə – *faza nöqtəsi* uyğun gəlir.

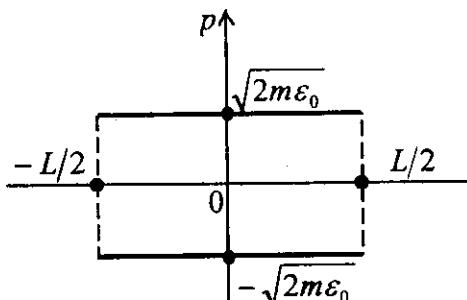
Sonralar, (2.1)-dən başqa, biz faza fəzasının həcm elementi $d\Gamma$ üçün də aşağıdakı simvolik işarədən istifadə edəcəyik:

$$d\Gamma = dq dp \equiv \prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i \quad (2.4)$$

buradan göründüyü kimi N hissəcikdən ibarət klassik sistemin faza fəzasının həcm elementinin ölçüsü $(təsir)^{3N}$ - dir.

Faza fəzasını iki alt fəzaya: impuls və konfiqurasiya alt fəzalarına bölmək olar. Onda faza fəzasında həcm elementi üçün $d\Gamma = d\Gamma_q \cdot d\Gamma_p$ yazmaq olar.

Bəzi sistemlər (məsələn, ideal qaz) üçün Γ -fəzası əvəzinə μ -fəzası daxil edirlər. μ -fəzası 6 ölçülü fəzadır və hər faza nöqtəsi bir zərrəciyin koordinat və impulsları $(x, y, z; p_x, p_y, p_z)$ ilə təyin olunur. Aydındır ki, μ -fəzasında N zərrəcikdən ibarət ideal qazın bir mikrohalı N faza nöqtələr çoxluğu ilə verilmiş olur.



Şəkil 1.2

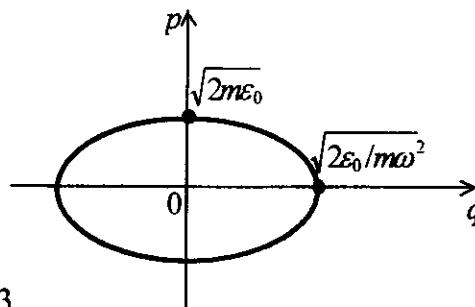
Sistemi təşkil edən zərrəciklərin $q_i(t)$ koordinat və $p_i(t)$ impulsları (2.2) tənliklərinə uyğun olaraq aramsız dəyişir, ona görə də sistemin mikrohalı dəyişir. Bu dəyişmə zamanı mikrohallara uyğun olaraq faza nöqtələrinin həndəsi yeri $6N$ ölçülü faza fəzasında müəyyən bir "eyri" emələ getirir. Bu eyri *faza trayektoriyası* adlanır.^{*)} Faza trayektoriyasının tənliyini prinsipçə (2.2) sisteminin həllindən almaq olar. Simvolik şəkildə bu həlləri belə yazmaq olar:

$$\begin{cases} q_i = q_i(t, q_{01}, q_{02}, \dots, q_{03N}; p_{01}, p_{02}, \dots, p_{03N}) \\ p_i = p_i(t, q_{01}, q_{02}, \dots, q_{03N}; p_{01}, p_{02}, \dots, p_{03N}), \end{cases} \quad (2.5)$$

^{*)} Bu eyrini adı üçölçülü fəzada zərrəciyin hərəkət trayektoriyası ilə qarışdırmaq olmaz.

haradakı q_0 , və p_0 -zərrəciklərin koordinat və impulslarının başlangıç qiymətləridir.

Qeyd edək ki, faza trayektoriyası qapalı ola bilər, lakin öz-özü ilə kəsişə və ya toxuna bilməz. Bu nəticə klassik mexanikada olan determinizm prinsipindən, yəni (2.2) tənliyinin (2.5) həllinin birqiyəmətli olmasından çıxır.^{*)} Faza trayektoriyasını sadə sistemlər üçün belə əyani şəkildə təsvir etmək, onu qrafiki olaraq göstərmək mümkün deyil. Yada salmaq kifayətdir ki, bir zərrəcikdən ibarət sistem üçün faza fəzası 6 ölçülüdür. Faza trayektoriyasını yalnız bir ölçülü fəzada hərəkət edən bir zərrəcik üçün qrafiki göstərmək mümkün kündür. Bu halda faza fəzası iki ölçülüdür. Şəkil 1.2-də bir ölçülü "qutuda" $-L/2 \leq a \leq L/2$ hüdudlarında sərbəst hərəkət edən m kütleli və verilmiş $\frac{p^2}{2m} = \varepsilon_0 = \text{const}$ enerjiyə malik zərrəciyin faza trayektoriyası göstərilmişdir.



Şəkil 1.3.

^{*)} Doğrudan da, əgər faza trayektoriyası kəsişsəydi, biz kəsişmə nöqtəsini başlangıç hal kimi qəbul edə bilərdik və onda sistemin halının sonrakı dəyişmələri birqiyəmətli olmazdı.

Enerjisi $\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = \varepsilon_0 = \text{const}$ olan xətti harmonik ossilyatorun faza trayektoriyası, şəkil 1.3-dən göründüyü kimi, yarımöxləri $\sqrt{2m\varepsilon_0}$ və $\sqrt{2\varepsilon_0/m\omega^2}$ olan ellipsoidur; ω -ossilyatorun dairəvi tezliyi, m -kütləsidir.

Kvant sistemləri. Zərrəciklərin hərəkəti kvant mexanikasının tənlikləri ilə təsvir olunan sistemlər – kvant sistemləri üçün faza fəzası, faza nöqtəsi və faza trayektoriyası anlayışlarının mənası yoxdur. Doğrudan da, Heyzenberqin qeyri-müəyyənlik prinsipindən çıxır ki, kvant zərrəciyinin q koordinat və p impulsu eyni zamanda birqiyəmtli təyin oluna bilməzlər. Bu kəmiyyətlərin prinsipial xətası Δq və Δp

$$\overline{(\Delta q)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.6)$$

münasibəti ilə əlaqədardır;

$$\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{san.},$$

h -Plank sabtidir.

Qeyri-relativistik kvant mexanikasında sistemin halı

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (2.7)$$

stasionar Şredinger tənliyi ilə təsvir olunur. Ψ_n və E_n məxsusi funksiya və enerjinin məxsusi qiymətləridir. Hamilton operatoru $\hat{\mathcal{H}}$ impulsu (2.3) ifadəsində $p_i \Rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ ilə əvəz etməklə alınır. Əgər ümumiləşmiş koordinat q_i , əvəzinə dekart koordinatları $r_i = r(x_i, y_i, z_i)$ götürsək, onda sistemin Hamilton operatoru $\hat{\mathcal{H}}$ aşağıdakı şəklə düşər:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.8)$$

burada ∇_i^2 -Laplas operatorudur. (2.7) tənliyində n sistemin bir kvant halını təyin edən bütün kvant ədədlərinin toplusunu göstərir. Sistemin dalğa funksiyası Ψ_n isə bütün zərrəciklərin koordinatlarından asılıdır, yəni $\Psi_n = \Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$.

Beləliklə, kvant sistemlərinin *mikroskopik halı* sistemin bir Ψ_n kvant halını tam təsvir edən kvant ədədlərinin toplusu ilə təyin olunur. Hər bir n mikrohala sistemin bir E_n enerjisi uyğun gələ biler və ya enerjinin bir qiymətine bir neçə mikrohal uyğun ola bilər, yəni kvant cırlaşması mümkündür.

Ümumi şəkildə istənilən real sistemlər üçün (2.7) tənliyini dəqiq həll etmək və mikrohalları təyin etmək mümkün deyil. Burada biz dəqiq həlli mümkün olan ən sadə ideal sistemlər üzərində dayanaq.

Düzbucaklı qutuda ideal qaz. Tutaq ki, tərəfləri L_x, L_y, L_z olan düzbucaklı qutuda bir-biri ilə təsirdə olmayan və hər birinin kütləsi m olan N sayda zərrəcik var. Belə ideal qazın tam enerjisi, aydınlaşdır ki, ayrı-ayrı zərrəciklərin enerjilərinin cəminə bərabərdir:

$$E_n = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{in} \quad (2.9)$$

burada

$$\varepsilon_{in} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{ix}^2 + k_{iy}^2 + k_{iz}^2) \quad (2.10)$$

i -nömrəli zərrəciyin kvant mexaniki enerjisi,

$$k_{ix} = \left(\frac{\pi}{L_x} \right) n_{ix}, \quad k_{iy} = \left(\frac{\pi}{L_y} \right) n_{iy}, \quad k_{iz} = \left(\frac{\pi}{L_z} \right) n_{iz} \quad (2.11)$$

zərrəciyin dalğa vektorunun komponentləri,

$$n_{ix}, \quad n_{iy}, \quad n_{iz} = 1, 2, 3, \dots \quad (2.12)$$

ixtiyari müsbət tam qiymətlər alan kvant ədədləridir.

Dalğa vektorunun (2.11) qiymətlərini (2.10)-da yerinə yazsaq ε_{in} -ni (2.12) kvant ədədləri vasitəsi ilə ifadə edərik:

$$\varepsilon_{in} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_{ix}^2}{L_x^2} + \frac{n_{iy}^2}{L_y^2} + \frac{n_{iz}^2}{L_z^2} \right) \quad (2.13)$$

Göründüyü kimi ideal qazın hər bir zərrəciyinin enerjisi n_x, n_y, n_z kimi üç kvant ədədi ilə təyin olunur (zərrəciyin spinini nəzərə alınmir). Kvant mexanikasından məlumdur ki, bu kvant ədədlərinin hər bir toplusuna qutuda olan zərrəciyin yalnız bir dalğa funksiyası, yəni bir kvant halı uyğun gəlir –cırlaşma yoxdur.

Zərrəciyin (2.13) enerjisini (2.9)-da nəzərə alsaq, deyə bilərik ki, qutuda olan ideal qazın bütövlükdə bir mikrohalı kvant mexanikası baxımından $3N$ sayda kvant ədədlərinin verilməsi ilə təyin olunur, yəni öyrənilən sistem üçün

$$mikrohal \Rightarrow (n_{1x}, n_{1y}, n_{1z}; n_{2x}, n_{2y}, n_{2z}; \dots; n_{Nx}, n_{Ny}, n_{Nz}) \quad (2.14)$$

$3N$ sayda kvant ədədlərinin toplusu ilə təyin olunur.

Ossilyatordan ibarət sistem. Fərz edək ki, baxdığımız sistem bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olmayan ω tezlikli N sayda xətti harmonik ossilyatordan ibarətdir. Ossilyatorlar arasında qarşılıqlı təsir olmadığından sistemin enerjisi üçün (2.9)

ifadəsi qüvvədə qalır, yalnız i -ci zərrəciyin (ossilyatorun) enerjisi

$$\varepsilon_i = (n_i + 1/2)\hbar\omega, \quad (2.15)$$

kimi ifade olunur, burada $n_i = 0, 1, 2, \dots$ ossilyator kvant ədədidir. Bu ədədin hər bir qiymətinə bir dalğa funksiyası, yəni bir kvant halı uyğun gəlir.

Bələliklə, N sayda xətti harmonik ossilyatorlardan ibarət olan ideal qaz üçün bir

$$mikrohal \Rightarrow (n_1, n_2, \dots, n_N) \quad (2.16)$$

N sayda kvant ədədlər toplusu ilə təyin olunur.

Rotatorlardan ibarət sistem. Aralarındaki məsafə r dəyişməyen və hər birinin kütləsi m' və m'' olan atomlardan təşkil olunmuş, bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olmayan N sayda rotatorlardan ibarət sistemə baxaq. Fərz edək ki, rotatorların hər biri fiksə edilmiş kütlə mərkəzindən keçən oxlar ətrafında fırlanır. Rotatorlar arasında qarşılıqlı təsir olmadığından sistemin tam enerjisi üçün (2.9) düsturu tətbiq oluna bilər, lakin hər bir rotatorun enerjisi kvant mexanikasında

$$\varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2I} l_i (l_i + 1) \quad (2.17)$$

ifadəsi ilə verilir. Burada $I = mr^2$ molekulun (rotatorun) ətalət momenti, $m = m'm''/(m' + m'')$ getirilmiş kütləsidir, $l_i = 0, 1, 2, \dots$ azimutal kvant ədədidir.

Qeyd edək ki, rotatorun dalğa funksiyası azimutal kvant ədədi l - dən başqa, l_i - in verilmiş qiyməti üçün

$$-l_i \leq m_i \leq l_i \quad (2.18)$$

intervalında dəyişən m_i "maqnit" kvant ədədindən də asılıdır. Deməli, rotatorun hər bir kvant halı iki kvant ədədi (l_i və m_i) ilə təyin olunur və onun enerji səviyyələri $(2l_i + 1)$ qat cırlaşmış olur (enerji m_i kvant ədədindən asılı deyil).

Beləliklə, vəziyyətləri fəzada fiksə olunmuş N sayda rotatordan ibarət sistemin

$$\text{mikrohalt} \Rightarrow (l_1, m_1; l_2, m_2; \dots; l_N, m_N) \quad (2.19)$$

$2N$ sayda kvant ədədlər toplusu ilə təyin olunur.

Tanış olduğumuz misallardan göründüyü kimi kvant sisteminin mikrohalını təyin edən kavnt ədədlərinin sayı onun sərbəstlik dərəcələrinin sayına bərabərdir. Doğrudan da, əgər N sayda ikiatomlu molekullardan ibarət ideal qaza baxsaq və nəzərə alsaq ki, hər molekulun 3 irəliləmə 1 rəqsi və 2 fırlama sərbəstlik dərəcəsi var, onda tam sistemin $6N$ sərbəstlik dərəcəsi olur. (2.14), (2.16) və (2.19)-dan görünür ki, baxılan sistemn bir mikrohalını təyin edən kvant ədədlərinin sayı da $6N$ -ə bərabərdir.

Kvaziklassik yaxınlaşma. Məlumdur ki, müəyyən şərtlər daxilində (kvaziklassik yaxınlaşmada) sistemin kvantmexaniki təsvirini klassik təsvirlə əvəz etmək olar, yəni xüsusi hallarda kvant sistemləri özlərini klassik sistemlər kimi aparır. Həmin şərtləri nəzərdən keçirək. Kvaziklassik yaxınlaşma o zaman mümkündür ki, iki qonşu enerji səviyyələri arasındaki fərq zərəciyin enerjisindən çox az olsun:

$$[\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n)] \ll \varepsilon(n) \quad (2.20)$$

Bu bərabərsizlik (2.13) halı üçün $(2n+1) \ll n^2$ şəklində düşür, yəni kvaziklassik yaxınlaşma yalnız çox böyük ($n \gg 1$) kvant ədədlərinə uyğun hallar üçün doğrudur. Bu nəticə yuxarıda baxılan bütün sistemlər üçün düzgündür.

Kvaziklassik yaxınlaşmanın (2.20) şərtini daha əyani şəkildə ifadə etmək olar: zərrəciyin orta istilik hərəket enerjisi $\varepsilon(n) = k_0 T$ enerji spektrinin diskretniyindən çox olduqda onun hərəkəti klassik sayla biler. Ölçüləri L olan qutudakı sərbəst zərrəcik (2.13) üçün bu şərtin açıq şəkli

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \ll k_0 T \quad (2.21)$$

kimi olur. Burada T - mütləq temperatur, k_0 - Boltsman sabiti. (2.21) şərtini aşağıdakı kimi də yaza bilərik

$$L \gg \lambda, \quad (2.22)$$

harada ki, $\lambda = \frac{\hbar}{p}$ zərrəciyin de-Broyl dalğasının uzunluğu,

$p = \sqrt{2mk_0T}$ orta impulsudur.

Deməli, sərbəst hərəkətin klassik olması üçün onun baş verdiyi fəzanın L xətti ölçüsü zərrəciyin de-Broyl dalğasının uzunluğundan çox-çox böyük olmalıdır.

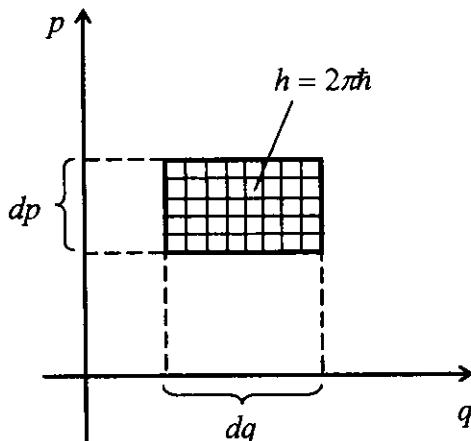
İndi də sistemin mikrohallarının sayı məsələsinə baxaq. Kvant sistemləri üçün enerjinin verilmiş intervallarına düşən mikrohalların sayı həmin intervalda olan kvant hallarının sayına bərabərdir. Kvant hallarını təyin edən kvant ədədləri diskret olduğundan müəyyən enerji intervalına düşən mikrohalların sayı sonludur.

Klassik sistemlər üçün bir mikrohal faza fəzasında bir nöqtənin koordinatları ilə təyin olunduğundan istənilən kiçik faza fəzası "həcm elementinə" formal olaraq "sonsuz" sayıda mikrohal uyğun gəlir. Lakin nəzərə alsaq ki, kvant mexanikasına görə bir sərbəstlik dərəcəsinə malik olan zərrəciyin bir kvant halına ikiölçülü faza fəzasında sonlu $h = 2\pi\hbar$ "həcmi" qarşı qoyulur (bax şəkil 1.4), onda ümumi halda $3N$

sərbəstlik dərəcəsinə malik olan sistemin bir kvant halına onun faza fəzasında $(2\pi\hbar)^{3N}$ "həcmi" uyğun gələr. Deməli, $d\Gamma = dqdp$ "həcm elementində" sistemin mikrohallarının sayı

$$dG = \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^{3N}} = \frac{\prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i}{(2\pi\hbar)^{3N}} \quad (2.23)$$

olar.



Şəkil 1.4

Qeyd edək ki, faza fəzasının "həcm elementi" ilə sistemin mikrohallarının sayı arasında olan (2.23) əlaqəsini kvaziklassik halda sistemin entropiyasının birqiyəməli təyini üçün istifadə edəcəyik (§1.6).

§ 1.3. Klassik sistemlərin statistik təsviri. Paylanma funksiyası. Liuvill teoremi }

Bundan əvvəlki paraqrafın başlanğıcında qeyd etdik ki, N zərrəcikdən ibarət klassik sistemin mikrohalını təyin etməkdən ötrü $6N$ sayda (2.1) kəmiyyətini bilmək lazımdır. Bunun üçün həmin sayda tənlikdən ibarət (2.2) sistemini həll etmək tələb olunur. Əgər (2.3) Hamilton funksiyasının açıq şəkli və başlanğıc şərtləri məlum olsa belə, zərrəciklərin N sayının həddən artıq böyük ədəd olduğundan (2.2) sistemini həll etmək çox çətindir və ya praktiki olaraq mümkün deyil. Bundan əlavə hər bir zərrəciyin koordinat və impulsunun istenilən anda məlum olması heç də makroskopik sistemin bütövlükdə xassələri haqqında məlumat vermir. Bu ona görə belədir ki, çoxlu sayda zərrəciklərdən ibarət makroskopik sistemlərdə keyfiyyətcə yeni, statistik qanuna uyğunluqlar meydana çıxır. Belə qanuna uyğunluqlar ehtimal xarakteri daşıyır və dəqiqlik mexaniki qanunlardan keyfiyyətcə fərqlənir. Deməli, makrosistemlərin halını statistik metodlarla təsvir etmək lazımdır. Bu metodların əsasında sistemin mikrohallarını dəqiqlik deyil, müəyyən ehtimalla təyin etmək durur.

Fərz edək ki, baxdığımız sistem izolə olunmuş çox böyük sistemin (termostatin) kiçik, lakin makroskopik hissəsini təşkil edir. Termostatla qarşılıqlı təsirdə olan sistemin mikrohalları zaman keçdikcə xaotik olaraq dəyişir və biz həmin halların (q, p) koordinatlarını faza fəzasında dəqiqlik təyin edə bilərik. Onda məsələni heç olmazsa belə qoymaq olar: hansı ehtimalla sistemin mikrohalları faza fəzasında $(dqdp)$ kiçik höcm elementinə düşər. Həmin ehtimalı təyin etmək üçün xəyalən sistemin mikrohalları üzərində çox uzun T müddətində müşahidə aparaq. Tutaq ki, müşahidə müddətinin dt intervalında sistemin mikrohalları faza fəzasının (q, p) nöqtəsi

ətrafında götürülmüş ($dqdp$) həcm elementində olmuşdur. Onda müşahidə müddətini sonsuz böyütsek

$$\left[\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\frac{dt}{T} \right) = dW \right] \quad (3.1)$$

kəmiyyətini sistemin mikrohallarına uyğun olan faza nöqtələrinin ($dqdp$) həcm elementinə düşmə ehtimalı kimi qəbul etmək olar.

Aydındır ki, dW ehtimalı ($dqdp$) $= \prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i$, həcm elementinin faza fəzasının hansı $(q, p) = (q_1, q_2, \dots, q_{3N}; p_1, p_2, \dots, p_{3N})$ nöqtəsi ətrafında götürülməsindən asılıdır və təbiidir ki, dW kəmiyyətinin qiyməti ($dqdp$) həcm elementi ilə düz mütənasib olmalıdır

$$\left[dW = \rho(q, p) dqdp \right] \quad (3.2)$$

Mütənasiblik əmsali $\rho(q, p)$ -sistemin mikrohallarının faza fəzasının (q, p) nöqtəsi ətrafında vahid həcm elementinə düşmə ehtimalını göstərir və *paylanma funksiyası* adlanır. Həndəsi olaraq $\rho(q, p)$ sistemin mikrohallarına uyğun olan faza nöqtələrinin faza fəzasının (q, p) nöqtəsi ətrafindakı sıxlığıdır, yəni mikrohalların faza fəzasında paylanması xarakterizə edir.

Paylanma funksiyasını bilməklə koordinat və impulsdan asılı olan istənilən $L(q, p)$ fiziki kəmiyyətin statistik orta qiymətini hesablaya bilərik

$$\bar{L}_\rho = \int L(q, p) \rho(q, p) dqdp. \quad (3.3)$$

Əslində isə sistemin halı təcrübədə ölçülən makroskopik