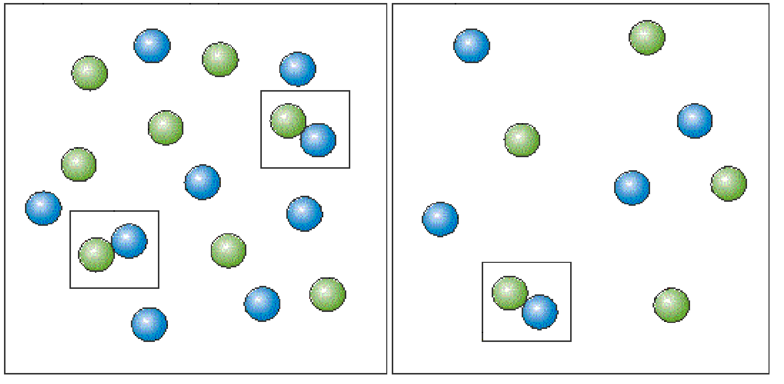
Ықтималдық тығыздығы. Ықтималдық тығыздығының нормалау шарты

Сыртқы жағдайы тұрақты, газбен толтырылған жабық ыдысты алайық. Ретсіз үздіксіз қозғалыстағы газдың молекулаларының әрекеттесуі себебінен, ыдыстың ішінде олардың таралуы хаосты болады. Сондай-ақ, бір молекуланы байқап, ыдыстың ішінде оның қозғалысын бақылауға мүмкіншілік бар делік. Ыдыстың V көлемін және оны қоршаған кеңістікті шексіз көп кішкене ΔV_i көлемдерге бөлейік, яғни $i = 1,2,3,\ldots$ Молекуланы байқау саны n делік. Әр байқау кезінде молекуланың ΔV_i көлемде орналасуы өзгеріп отырады. Байқау саны n ($n \to \infty$) кезінде, молекула ΔV_i көлемде m_i рет болды делік. Онда ΔV_i көлемдегі молекулалардың байқалуының ықтималдығы былай анықталады:

$$P(\Delta V_i) = \lim_{n\to\infty} \frac{m_i}{n}$$



Ыдыстың сыртындағы ΔV_i көлемдерде молекула байқалмайды, себебі ыдыс жабық, онда $m_i=0$. Яғни $P(\Delta V_i)=0$. Ыдыстың ішінде ықтималдық нольге тең болмайды және өзгеріп отырады. Мысалы, ыдыс ауырлық өрісінде орналасса, онда оның жоғарғы жағындағы ықтималдығы ыдыстың түбіне қарағанда кемірек болады. Дегенмен, бұл ықтималдық ΔV_i көлемге тәуелді, сондықтан қолдануға ыңғайсыз. Сондықтан ықтималдық тығыздығы деген ұғымды қолданады, ол былай анықталады:

$$p(x,y,z)=\lim_{\Delta V_i\to 0}\frac{P(\Delta V_i)}{\Delta V_i}=\lim_{\Delta V_i\to 0}\frac{m_i}{\Delta V_i\cdot n}, \qquad (10)$$

Демек, (10)-ға сәйкес dm саны мынаған тең болады:

$$dm = n_0 p(x,y,z)dV = n_0 p(x,y,z)dxdydz \tag{11}$$

Шектеулі V_1 көлемде молекула $m(V_1)$ болады, яғни

$$m(V_1) = n_0 p(x,y,z)dxdydz$$

Осыдан бақылау кезінде молекуланың V_1 көлемде болуының ықтималдығы

$$P(V_1) = \frac{m(V_1)}{n_0} = \int_{V_1} p(x,y,z)dxdydz \tag{12}$$

Егер барлық кеңістік V_1 ретінде алынса, демек $V_1 \to \infty$

$$P(V_1 \to \infty) = \frac{m(V_1 \to \infty)}{n_0} = 1 =$$

.

$$\int\limits_{V_1 \to \infty} p(x, y, z)\, dxdydz, \qquad (14)$$

$$\int\limits_{V_1 \to \infty} p(x, y, z)\, dxdydz = 1. \qquad (15)$$

Ықтималдықтардың нормалау шарты

Жүйеде байқалуы мүмкін оқиғалар саны *i=1,2,..., n* делік. *i*-оқиға санын m_i деп белгілейік. Онда

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_n = \sum_{i=1}^{n} m_i = n \quad . (16)$$

(2) анықтама бойынша

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i}{n} = \sum_{i=1}^{n} P_i = 1 \, ,$$

демек

$$\sum_{i} P_i = 1 \, . \qquad (17)$$

Осы (17)-шы теңдеуді *ықтималдықтардың нормалау ша*рты дейді.

Флуктуациялар

Орташа квадраттық ауытқудың квадраттық түбірі орташадан ауытқудың өлшеуіші болады,

$$\sqrt{\Delta\overline{x}^2} = \sqrt{\prec\left(\Delta x^2\right)\succ}$$

оны δ деп белгілеп x шаманың флуктуациясы (латынның *fluactuatio* – тербелу) дейді:

$$\delta = \sqrt{\prec\left(\Delta x^2\right)\succ}, \qquad (18)$$

демек

$$\delta = \sqrt{\prec\left(\Delta x^2\right)\succ} = \sqrt{\overline{x}^2 - \left(\overline{x}\right)^2}$$,мұндағы $\prec x^2 \succ$ –

x шаманың квадратының орташасы, $\left(\overline{x}^2\right)$ – осы шаманың орташа мәнінің квадраты.

N бөлшектерден тұратын жүйені сипаттайтын m аддитивтік шама болсын, демек

$$m = \sum_k m_k \tag{19}$$

мұндағы m_k – жүйені бейнелейтін нүкте γ – кеңістіктің k – ұяшығында болатынын көрсететін айнымалы шама.

Аддитвтік қасиетке m шаманың орташасы да ие болады:

$$\overline{m} = \sum_k \overline{m}_k \tag{20}$$

Енді осы m шаманың флуктуациясын анықтайық.

$$\prec (\Delta m)^2 \succ = \sum_k \prec (\Delta m_k)^2 \succ , \tag{21}$$

мұндағы $\Delta m = m - \prec m \succ$; $\Delta m_k = m_k - \prec m_k \succ$.

Жүйенің бөлшектері бірдей, тепе-тең сол себептен

$$\prec \left(\Delta m_1\right)^2 \succ = \prec (\Delta m_2^2) \succ = \ldots = \prec \left(\Delta m_c\right)^2 \succ, \qquad (22)$$

олай болса

$$\prec \left(\Delta m\right)^2 \succ = N \prec \left(\Delta m_c\right)^2 \succ, \qquad (23)$$

Осыдан m шаманың флуктуациясы:

$$\delta = \sqrt{\prec \left(\Delta m\right)^2 \succ} \sim \sqrt{N}, \qquad (24)$$

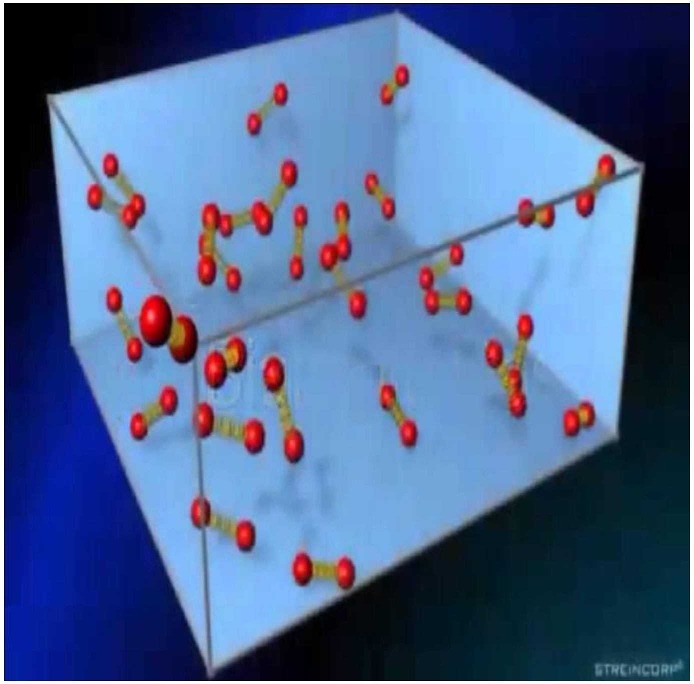
сондықтан жүйенің бөлшектерінің саны көбейсе, δ да өседі.

Бірақ, жүйедегі байқалатын ауытқуларды сипаттау үшін салыстырмалы флуктуацияны қолданған тиімді. δ – флуктуацияның m шаманың орташа мәніне қатынасы *салыстырмалы флуктуация* деп аталады, төмендегі өрнекпен анықталады:

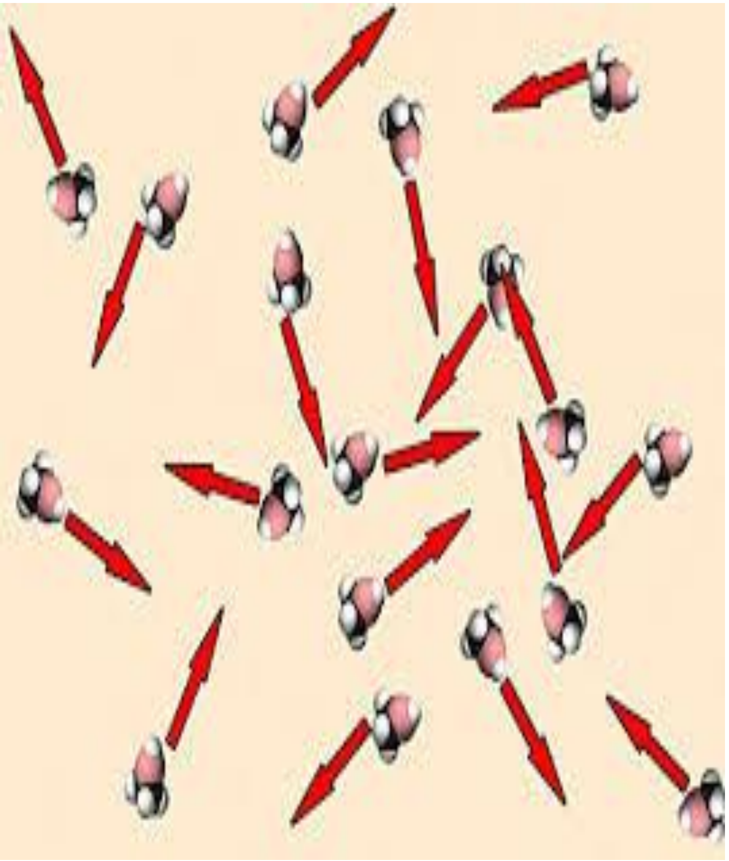
$$k = \frac{\sqrt{\prec \left(\Delta m\right)^2 \succ}}{\prec m \succ}. \qquad (25)$$

Броундық қозғалыс

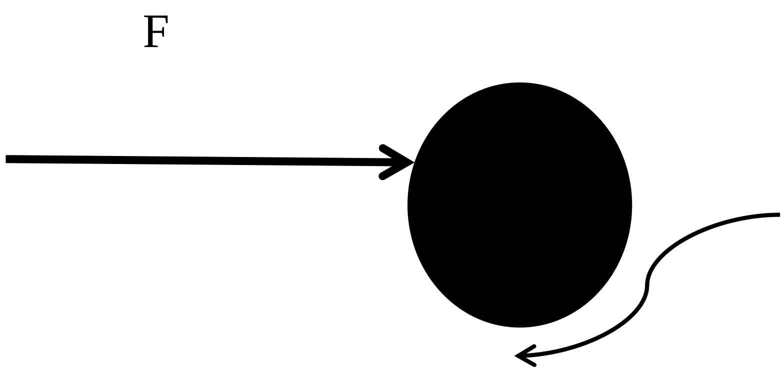
Молекулалардың қозғалысының дәлелінің бірі броундық қозғалыс. Бұл құбылысты ағылшын ботанигі Броун 1827 жылы ашты.



Броундық бөлшектердің қозғалысы температура мен бөлшектердің мөлшеріне байланысты



Броундық қозғалыстың әсерінен бөлшекке F күш және оған қарсы ортаның f үйкеліс күші әсер етсін.



Стокс заңы бойынша f

$$f = 6\pi\eta a v \qquad (1)$$

Ньютонның 2 заңы бойынша бөлшектің қозғалыс теңдеуі

$$m\ddot{r} = F - 6\pi\eta a\dot{r} \qquad (2)$$

Радиус-векторын кез-келген координат бойынша жазайық

$$m\ddot{x} = F_x - 6\pi\eta a\dot{x} \qquad (3)$$

Мақсатымыз броундық бөлшектердің ығысуын табу, яғни x. Бөлшектер әр түрлі бағытта ығысатын болғандықтан $\sum x=0$. Ығысудың орташа проекциясы да 0-ге тең. Ал, $\overline{x^2} \neq 0$, сол себептен (3) өрнектің екі жағында x көбейтеміз

$$m x\ddot{x} = xF_x - 6\pi\eta a x\dot{x} \qquad (4)$$

Мынадай қағиданы пайдаланамыз

$$x\ddot{x} = \frac{1}{2}\frac{d^2(x^2)}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2, \qquad x\dot{x} = \frac{1}{2}\frac{d(x^2)}{dt}.$$

$$\frac{m}{2}\frac{d^2(x^2)}{dt^2}-m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2=-3\pi\eta a\frac{d(x^2)}{dt}+xF_x.$$

Бұл өрнек жеке бір бөлшек үшін болғандықтан, орташа мәндер үшін де пайдалануға болады

$$\frac{m}{2}\frac{d^2(\overline{x^2})}{dt^2}-m\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2}=-3\pi\eta a\frac{d(\overline{x^2})}{dt}+\overline{xF_x},$$

$\overline{x^2}$ - Бөлшектердің орташа квадраттық ығысуы

$\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2}$ - Жылдамдықтарының квадратының орта мәні

$\overline{xF_x} = 0$ Себебі бөлшектердің соқтығысы кезіде x, F теріс және оң мәндерге ие болуы мүмкін

Сондықтан (2) өрнек былай жазылады

$$\frac{m}{2}\frac{d^2\left(\overline{x^2}\right)}{dt^2} - m\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} = -3\pi\eta a\frac{d\left(\overline{x^2}\right)}{dt} \qquad (5)$$

$$\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} = \overline{\left(\frac{dy}{dt}\right)^2} = \overline{\left(\frac{dz}{dt}\right)^2}.$$

$$\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} + \overline{\left(\frac{dy}{dt}\right)^2} + \overline{\left(\frac{dz}{dt}\right)^2} = \overline{v^2}$$

$$\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} = \frac{1}{3}\overline{v^2}$$

$$m\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} = \frac{1}{3}m\overline{v^2} = \frac{2}{3}\frac{m\overline{v^2}}{2}.$$

$$\frac{m\overline{v^2}}{2} = \frac{3}{2}kT$$

$$m\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2} = \frac{2}{3}\frac{m\overline{v^2}}{2} = kT \qquad (6)$$

Броундық бөлшектің кинетикалық энергиясы

(5) және (6) өрнекке қайтып оралайық. Оларды мына түрде жазамыз

$$\frac{m}{2}\frac{d^2\left(\overline{x^2}\right)}{dt^2} - kT = -3\pi\eta a\frac{d\left(\overline{x^2}\right)}{dt}.$$

$\frac{d\left(\overline{x^2}\right)}{dt} = Z$ деп алып осы өрнекті интегралдаймыз

$$\frac{m}{2}\frac{dZ}{dt}-kT=-3\pi\eta aZ,$$

Айнымалыларды бөліп аламыз, содан $$\frac{dZ}{Z-\frac{kT}{3\pi\eta a}}=-\frac{6\pi\eta a}{m}dt.$$

$$\int_0^Z\frac{dZ}{Z-\frac{kT}{3\pi\eta a}}=-\int_0^t\frac{6\pi\eta a}{m}dt,$$ немесе

$$\ln\left(Z-\frac{kT}{3\pi\eta a}\right)-\ln\left(-\frac{kT}{3\pi\eta a}\right)=-\frac{6\pi\eta a}{m}t.$$

Осыдан $$Z=\frac{kT}{3\pi\eta a}\left(1-e^{-\frac{6\pi\eta a}{m}t}\right)=\frac{d\left(\overline{x^2}\right)}{dt}.$$

$$\frac{d}{dt}\left(\overline{x^2}\right) = \frac{kT}{3\pi\eta a} \qquad (7)$$

Себебі $e^{-\frac{6\pi\eta a}{m}t}$ шамадағы бөлшектің размерлері өте кішкентай

$$\frac{\Delta\overline{x^2}}{\Delta t} = \frac{kT}{3\pi\eta a} \longrightarrow \Delta\overline{x^2} = \frac{kT}{3\pi\eta a}\Delta t. \qquad (8)$$

(8) Өрнек броундық бөлшектің X осі бойынша Δt уақыттағы ығысуының орташа квадраттық мәні