

ветствующего ограничения задач теории. Характеризующие макроскопич. тела параметры испытывают с течением времени беспорядочные малые колебания (флуктуации) относительно нек-рых ср. значений. Задачей теории является вычисление этих ср. значений, а не точных значений параметров в данный момент времени. Наличие статистич. закономерностей выражается в том, что поведение ср. значений в широких пределах не зависит от конкретных нач. условий (от точных значений нач. координат и скоростей частиц). Важнейшее проявление этой закономерности — известный из опыта факт, что система, изолированная от внеш. воздействий, с течением времени приходит в нек-рое равновесное состояние (термодинамич. равновесие), свойства к-рого определяются только такими общими характеристиками нач. состояния, как число частиц, их суммарная энергия и т. п. (см. *Равновесие термодинамическое*). Процесс перехода системы в равновесное состояние наз. *релаксацией*, а характерное время этого процесса — *временем релаксации*.

Функция распределения. Рассмотрим систему, состоящую из N частиц, для простоты считая, что частицы не имеют внутр. степеней свободы. Такая система описывается заданием $6N$ переменных: $3N$ координат x_i и $3N$ импульсов p_i частиц, совокупность этих переменных сокращенно обозначим (p, x) .

Понятие *функции распределения* естественно возникает, если рассмотреть пространство $6N$ измерений, соответствующее значениям координат и импульсов частиц; оно наз. *фазовым пространством*. Каждому моменту времени t соответствуют определ. значения всех x и p , т. е. нек-рая точка в фазовом пространстве, изображающая состояние системы в данный момент. С течением времени значения x и p меняются, так что точка в фазовом пространстве движется.

Вычислим ср. значение \bar{f} по заданному интервалу времени нек-рой ϕ -ции координат и импульсов $f(x, p)$. Для этого выберем на этом интервале s моментов времени t_a , разделенных равными промежутками, им соответствует s точек в фазовом пространстве. Разобьем всё фазовое пространство на элементы, размер к-рых мал по сравнению с характерными для системы значениями x и p , но ещё настолько велик, что в каждом из них находится много точек, изображающих состояние системы в моменты времени t_a . Тогда число таких точек в элементе объема будет примерно пропорционально величине этого объема $dx dp$. Если обозначить коэф. пропорциональности, т. е. плотность числа точек в пространстве, через $w(x, p)$, то число точек для элемента с центром в нек-рой точке (x, p) запишется в виде:

$$d\nu = w(x, p) dx dp, \quad (1)$$

где $dx dp = dx_1 dp_1 dx_2 dp_2 \dots dx_{3N} dp_{3N}$ — объем выбранного элемента фазового пространства. Ср. значение \bar{f} , вычисленное по определению

$$\bar{f} = s^{-1} \sum_{a=1}^s f(x(t_a), p(t_a)),$$

с учётом малости этих элементов объема можно переписать как

$$\bar{f} = \int f(x, p) w(x, p) dx dp \quad (2)$$

(интегрирование по координатам производится по всему объёму системы, по импульсам — от $-\infty$ до ∞). ϕ -ция $w(x, p)$ наз. ϕ -цией распределения по координатам и импульсам частиц. Поскольку полное число выбранных точек равно s , ϕ -ция w удовлетворяет условию нормировки:

$$\int w(x, p) dx dp = 1. \quad (3)$$

Из (2) и (3) видно, что $w dx dp$ можно рассматривать как вероятность того, что система находится в элементе $dx dp$ фазового пространства.

Если система не находится в состоянии термодинамич. равновесия, ϕ -ция распределения зависит, кроме x и p , от времени t . В этом случае следует считать, что интервал усреднения мал по сравнению со временем релаксации.

Введённой таким образом ϕ -ции распределения можно дать и др. истолкование. Для этого рассмотрим одновременно большое число одинаковых систем и примем, что каждая точка в фазовом пространстве изображает состояние одной такой системы. Тогда усреднение по времени можно понимать как усреднение по совокупности этих систем, или, как говорят, по *статистическому ансамблю*.

Распределение Гиббса. Проведённые до сих пор рассуждения носили формальный характер, т. к. нахождения ϕ -ции распределения, согласно (1), требует знания всех x и p во все моменты времени, т. е. решения ур-ний движения с соответствующими нач. условиями. Осв. положением С. ϕ . является утверждение о возможности из общих соображений определить эту ϕ -цию для системы, находящейся в состоянии термодинамич. равновесия. Прежде всего, исходя из сохранения числа частиц при движении, можно показать, что ϕ -ция распределения является интегралом движения системы (см. *Лиувилля теорема*).

При движении замкнутой системы её энергия не меняется, поэтому все точки в фазовом пространстве, изображающие состояние системы в разные моменты времени, должны лежать на нек-рой гиперповерхности, соответствующей нач. значению энергии E . Ур-ние этой поверхности имеет вид $H(x, p) = E$, где $H(x, p)$ — *Гамильтона функция* системы. Движение системы из мн. частиц носит крайне запутанный характер, поэтому с течением времени точки, описывающие состояние, распределяются по поверхности пост. энергии равномерно (см. также *Эргодическая гипотеза*). Такое равномерное распределение описывают ϕ -цией распределения

$$w(x, p) = A \delta[H(x, p) - E], \quad (4)$$

где $\delta[H(x, p) - E]$ — дельта-функция, отличная от нуля только при $H = E$, A — постоянная, определяемая из условия нормировки (3). ϕ -ция распределения (4), соответствующая *микростатистическому распределению Гиббса*, позволяет вычислять ср. значения всех физ. величин по ϕ -ле (2), не решая ур-ний движения.

При выводе выражения (4) предполагалось, что единственная сохраняющаяся величина, от к-рой зависит w , — это энергия системы. Разумеется, сохраняются также импульс и момент импульса, но эти величины можно исключить, предположив, что рассматриваемое тело заключено в неподвижный ящик, к-рому частицы могут отдавать импульс и момент.

Фактически в С. ϕ . обычно рассматривают не замкнутые системы, а макроскопич. тела, являющиеся малыми макроскопич. частями, или подсистемами, к.-л. замкнутой системы. ϕ -ция распределения для подсистемы отлична от (4), но не зависит от конкретного вида остальной части системы, т. н. термостата. Для определения ϕ -ции распределения подсистемы необходимо проинтегрировать ϕ -лу (4) по импульсам и координатам частиц термостата. Такое интегрирование можно проинтегрировать, учитывая малость энергии подсистемы по сравнению с энергией термостата. В результате для ϕ -ции распределения подсистемы получается выражение

$$w(x, p) = \exp\{[F - H(x, p)]/kT\}, \quad (5)$$

величина T в этой ϕ -ле имеет смысл темп-ры. Нормировочный коэф. $\exp(F/kT)$ определяется из условия нормировки (3):

$$\exp(-F/kT) = Z = \int \exp[-H(x, p)/kT] dx dp. \quad (6)$$