KIẾN THỨC TỔNG QUÁT & Ý NGHĨA CHƯƠNG 1, 2, 3

Võ Quốc Phong

Bộ môn Vật Lý Lý Thuyết
Đại học Khoa học - Tự nhiên

Chương 1 trình bày 4 nguyên lý, nền tảng thấy tính thống kê

Nguyên Lý 0, 1

- NL0: $\phi(P, V) = \theta \sim T$.
- NL1: $\Delta U = \delta Q + \delta A$

Ý nghĩa NL 0, 1

- NL0,1: xuất hiện P, V, T, U, A, Q.
- Hệ sẽ có nhiều cách thức lựa chọn (A, Q) sao cho có cùng 1 năng lượng E. Nên hệ ở mức năng lượng E có tính xác suất.

Nguyên Lý 2, 3

- NL2: $\Delta S \geq 0; \Delta S = \frac{\delta Q}{T}$
- NL3: $S \longrightarrow 0; T \longrightarrow 0$

Ý nghĩa NL2, 3

- NL2: Hệ diễn tiến sao cho S luôn tăng. Mà S liên hệ với $\delta Q/T$ vì vậy, diễn biến của hệ có tính "lựa chọn", tính xác suất-thống kê.
- NL 3: Thể hiện tính tới hạn của hệ.

Chương 2 trình bày cơ học Hamilton, công cụ Vật lý mô tả tính thống kê của hệ

Hệ cổ điển mô tả bằng Hamilton

- $H = H([p], [q])$
- Không gian pha Γ
- Thể tích không gian pha $d\Gamma = dp_1 ... dp_N dx_1 ... dx_N$
- Trạng thái vi mô cổ điển: $([p], [q])$.
- $\int d\Gamma = \int d\Gamma'$ (trong phần bài tập về nhà).
- Số điểm pha: $\Omega(E) = \int \frac{d\Gamma}{h^f}$

Khi mô tả hệ bằng các trạng thái vi mô

- Ta sẽ thấy thêm tính thống kê của hệ.
- Hệ ứng với một mức năng lượng E, trong không gian pha, ứng với mức năng lượng này hệ có số trạng thái vi mô dày đặt.

Chương 3 trình bày các công cụ toán xác suất thống kê; các nguyên lý Vật lý, như định nghĩa entropy thống kê

Các nguyên lý xác suất thống kê

- Xác suất, hàm phân bố xác suất: $\int \rho(x)dx = 1$.
- Nguyên lý Egrodic
- Nguyên lý độc lập thống kê.
- Định nghĩa Entropy $S(E) = k_B \ln \Omega(E)$.
- Nguyên lý tăng Entropy thống kê.
- Phương trình Louisville: $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} - \{\rho, \mathscr{H}\} = 0$.
- Phân bố vi chính tắc: $\rho = const$.
- Phân bố vận tốc Maxwell $\phi(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} dv$

Tính xác suất thống kê

- Từ phân bố Maxwell, ta thấy giữa entropy và xác suất có mối quan hệ với nhau dưới dạng Ln, từ đây thể hiện tính thống kê của nguyên lý 2.
- Từ phương trình và định lý Louisville, ta thấy rằng mật độ không gian pha chuẩn hóa như một mật độ xác suất. Nên trạng thái vi mô như biến ngẫu nhiên.
- Mô tả hệ bằng Hamilton có thể mô tả tính thông kê của hệ.

Hệ cổ điển và lượng tử

Cổ điển

- Trạng thái vi mô cổ điển $([q], [p])$. Hệ được xác định bằng Hamilton. $H = T + U$.
- Tính tổng số trạng thái vi mô: $\int d\Gamma$ trên một bề mặt Hamilton hay năng lượng. Tích phân này thường rất khó tính. Có thể dùng phép biến đổi chính tắc để chuyển không gian pha để tính dễ hơn.
- Hệ là hệ vi chính tắc. Hay hệ có sự phân bố xác suất đều.

Lượng tử

- Trạng thái vi mô lượng tử được xác định bằng bộ tham số lượng tử của hệ.
- Trong biểu diễn năng lượng, không cần tính tổng số trạng thái vi mô. Mà ta có luôn xác suất của 1 trạng thái năng lượng (xác suất=số trạng thái/tổng số trạng thái).
- Hệ vi chính tắc lượng tử=Cơ lượng tử=Pt Schrodinger.

Tổng kết 3 chương

Tổng kết

$$\left\{\begin{array}{l} \boxed{\text{4 nguyên lý [đặc biệt nguyên lý 2].}} \\ + \\ \text{Cơ học}\mathscr{H}\text{ : mô tả hệ nhiều hạt} \\ \Downarrow \\ \text{Không gian pha, trạng thái vi mô} \end{array}\right. \Longrightarrow \text{Mô tả được tính thống kê của hệ.} \quad (1)$$

- Từ các phân tích của 3 chương, chúng ta bắt đầu nghĩ đến các tính chất thống kê của các hệ vật lý.
- Tuy nhiên, từ 4 nguyên lý chúng ta cần phân tích tiếp để hé mở tính thống kê rõ ràng hơn, khi phân tích các trao đổi và cân bằng giữa hệ và môi trường, đây là nội dung chương 4.

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{\frac{-x^2}{a^2}} = \sqrt{\pi}\frac{a^{2n+1}(2n-1)!!}{2^{n+1}} \tag{2}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{\frac{-x^2}{a^2}} = \frac{a^{2n+2}n!}{2} \tag{3}$$

$$0!! = 1; 1!! = 1; 8!! = 8.6.4.2, 9!! = 9.7.5.3.! \tag{4}$$

$$-1!!! = 1; -3!! = -1; -5!! = 1/[(-3)(-1)] = 1/3, -7!! = -1/[(-5)(-3)(-1)] = -1/15 \tag{5}$$

Các giai thừa kép của số nguyên âm chẵn là không xác định!

Các công thức tích phân Gauss

Bán kính $R^2 = \sum_{i=1}^{d} x_i^2$, ta lưu ý

$$dx_1....dx_d = S_d.R^{d-1}.dR \tag{6}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^{d} e^{-x_i^2} dx_i = \int_0^{+\infty} S_d R^{d-1} e^{-R^2} dR. \tag{7}$$

Ta đổi biến $y = R^2$ thì được

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^{d} e^{-x_i^2} dx_i = \frac{S_d}{2} \int_0^{+\infty} y^{d/2-1} e^{-y} dy = \frac{S_d}{2}(d/2-1)!. \tag{8}$$

So sánh thì rút ra được

$$S_d = \frac{2(\pi^{d/2})}{(d/2-1)!}. \tag{9}$$

Nếu ta bỏ đi hàm $e^{-x_i^2}$, thì ta có:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^{d} dx_i = \int_0^{+\infty} S_d R^{d-1} dR. \tag{10}$$

$$|J| = \frac{\partial(x_1, x_2, ..., x_N)}{\partial(y_1, y_2, ..., y_N)} \tag{11}$$

- **Jacobian của hai hàm u,v đối với biến số x,y:**

$$\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{vmatrix}. \tag{12}$$

Định thức Jacobi có các tính chất sau:

$$\frac{\partial(u,y)}{\partial(x,y)} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_y \quad ; \quad \frac{\partial(x,v)}{\partial(x,y)} = \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)_x ; \tag{13}$$

$$\frac{\partial(v,u)}{\partial(x,y)} = -\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \quad ; \quad \frac{\partial(u,v)}{\partial(y,x)} = -\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} ; \tag{14}$$

$$\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(u,v)}{\partial(t,s)} . \frac{\partial(t,s)}{\partial(x,y)} \quad ; \quad \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(u,v)}{\partial(t,s)} \Big/ \frac{\partial(x,y)}{\partial(t,s)} ; \tag{15}$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(du/dt, v)}{\partial x, y} + \frac{\partial(u, dv/dt)}{\partial x, y}. \tag{16}$$

Công thức Stirling

$$N! = \sqrt{2\pi N}\left(\frac{N}{e}\right)^N. \tag{17}$$

$$lnN! = (N + 1/2)lnN - N + 1/2ln2\pi. \tag{18}$$

Khi N rất lớn:

$$lnN! = NlnN - N. \tag{19}$$

$$ln(1 \pm x) = \pm x - x^2/2. \tag{20}$$

Chuỗi Taylor cho hàm e^x:

$$e^x = \sum_{n=0} \frac{x^n}{n!}. \tag{21}$$