Лекция 2

Уравнение баланса энтропии и законы сохранения

На прошлой лекции…

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{f}(q,t)+\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\left(\vec{\mathrm{v}}(q,t)\tilde{f}\right)+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\left(\vec{F}(q,t)\tilde{f}\right)=\Gamma_{\mathrm{in}}(t)-\Gamma_{\mathrm{out}}(t).$$

Когда система консервативная:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{f}(q,t)+\left\{\tilde{f},H\right\}=\Gamma_{\mathrm{in}}(t)-\Gamma_{\mathrm{out}}(t).$$

$$\int\tilde{f}(q,t)\frac{dpdr}{\left(2\pi\hbar\right)^{d}}=N,$$

$$n(r,t)=\int\tilde{f}(q,t)\frac{dp}{\left(2\pi\hbar\right)^{d}},$$

$$\vec{j}(r,t)=\int\vec{\mathrm{v}}(q,t)\tilde{f}(q,t)\frac{dp}{\left(2\pi\hbar\right)^{d}}.$$

На прошлой лекции…
Равновесное распределение…

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{f}(q,t)+\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\left(\vec{\mathrm{v}}(q,t)\tilde{f}\right)+\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\left(\vec{F}(q,t)\tilde{f}\right)=\Gamma_{\mathrm{in}}(t)-\Gamma_{\mathrm{out}}(t).$$

Когда система консервативная:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{f}(q,t)+\left\{\tilde{f},H\right\}=\Gamma_{\mathrm{in}}(t)-\Gamma_{\mathrm{out}}(t).$$

$$\boxed{f_{eq}=function\left(H,T,\mu\right)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f_{eq}=0,\quad \left\{f_{eq},H\right\}=0,\quad \Rightarrow\quad \left[\Gamma_{\mathrm{in}}(t)-\Gamma_{\mathrm{out}}(t)\right]_{f\to f_{eq}}=0.$$

Упражнение.
Барометрическая формула.

$$f_{eq}(z,p)=\exp\left(-\frac{\dfrac{p^2}{2m}+mgz-\mu}{T}\right)=const\cdot\exp\left(-\frac{H(z,p)}{T}\right),$$

$$\mu=T\ln\left(n(z)\left[\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right]^{-3/2}\right)+mgz=T\ln\left(n(z=0)\left[\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right]^{-3/2}\right).$$

$$\boxed{f_{eq}=function\left(H[r,p],T,\mu\right)}$$

Вывод:

$$\boxed{f_{eq} = function\left(H_{\text{single particle}}, T, \mu\right)}$$

$$\boxed{\left[\Gamma_{\text{in}}(t) - \Gamma_{\text{out}}(t)\right]_{f \to f_{eq}} = 0}$$

Вопрос для самопроверки.

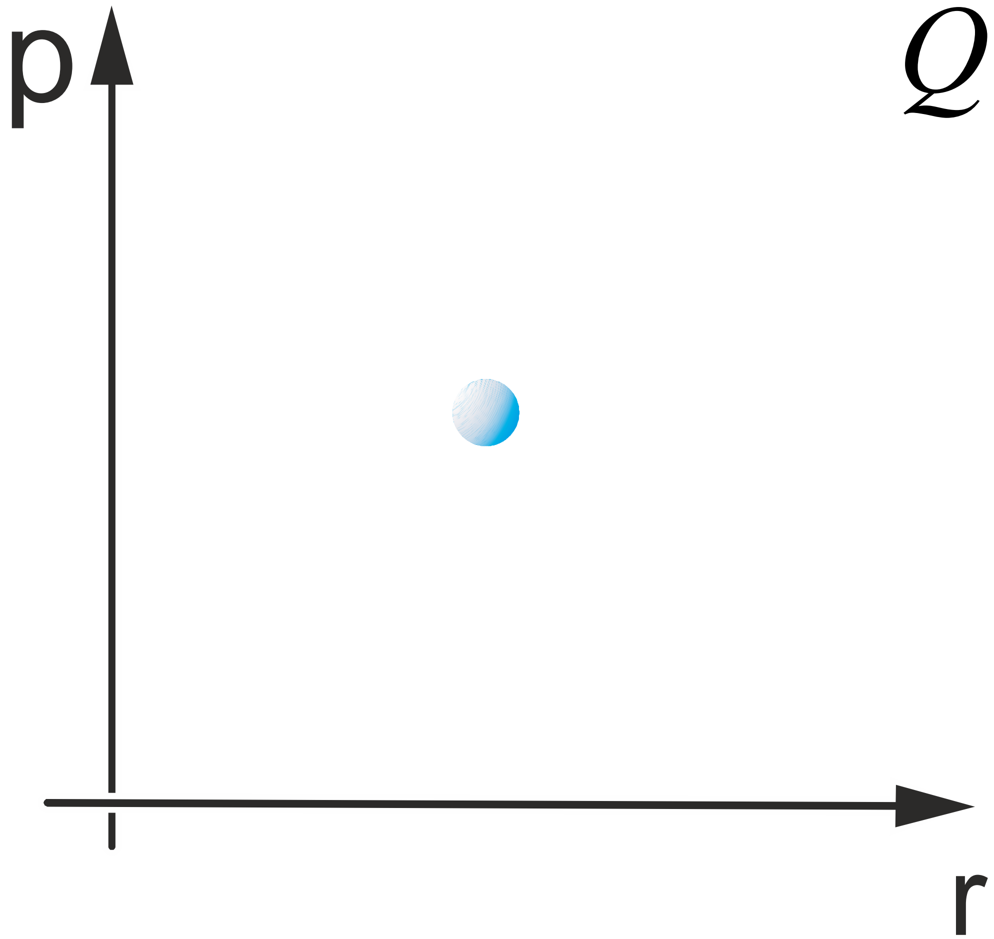
Уравнение Лиувиля выведено из плотности в фазовом пространстве взятой в виде суперпозиции Delta-функций.

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\left(\vec{\mathrm{v}}(q,t) f\right) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}}\left(\vec{F}(q,t) f\right) = 0.$$

Как же получаются гладкие решения такого уравнения? Например, равновесное…

Как вводилось понятие равновесия в статистической физике?

Статистическая система в фазовом пространстве…



$$Q = \left(\{ \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N \}, \{ \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N \} \right)$$

Координаты ВСЕХ степеней свободы системы
в фазовом пространстве.

$$f^{(N)}(Q,t) = \delta(Q - Q(t)),$$

$$Q = \left(\{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N\},\{\vec{p}_1,\ldots,\vec{p}_N\}\right) = (R,P).$$

$$f^{(N)}(Q,t) = \delta(Q - Q(t)),$$

Уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f^{(N)}(Q,t)d\Gamma = \int \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\frac{d}{dQ(t)}\delta(Q-Q(t))d\Gamma = -\int \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\frac{d}{dQ}\delta(Q-Q(t))d\Gamma = -\int \mathrm{div}(J)d\Gamma,$$

$$J = \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\delta(Q-Q(t)),$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \mathrm{div}\, J = 0.}$$

Вопрос: мы рассматриваем замкнутую систему?

$$Q = \left(\{ \vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N \}, \{ \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N \} \right) = (R, P).$$

$$J = J = \frac{\partial Q(t)}{\partial t} \delta(Q - Q(t)) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial H[Q]}{\partial P} f^{(N)}(Q,t) \\ -\dfrac{\partial H[Q]}{\partial R} f^{(N)}(Q,t) \end{pmatrix}.$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \mathrm{div}\, J = 0.}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \left\{ f^{(N)}(Q,t), H(Q,t) \right\} = 0.}$$

$$Q = \left(\{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N\}, \{\vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N\} \right) = (R, P).$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \left\{ f^{(N)}(Q,t), H(Q,t) \right\} = 0.}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) f^{(N)} = 0}$$

Вывод:

уравнение Лиувилля для многочастичной функции распределения:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \left\{ f^{(N)}(Q,t), H(Q,t) \right\} = 0.}$$

Многочастичная функция распределения постоянна вдоль фазовых траекторий.

Оператор Лиувилля

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) + \left\{ f^{(N)}(Q,t), H(Q,t) \right\} = 0.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q,t) = -i\hat{L} f^{(N)}(Q,t).$$

Если гамильтониан не зависит от времени, то

$$f^{(N)}(Q,t) = \exp\left(-i\hat{L}t\right) f^{(N)}(Q,t=0)$$

Оператор Лиувилля

$$\frac{\partial}{dt}B(Q) = \dot{Q}\frac{\partial}{\partial Q}B(Q) = \dot{Q}\frac{\partial}{\partial Q}B(\{R,P\}) + \dot{P}\frac{\partial}{\partial P}B(\{R,P\}) = i\hat{L}B.$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(N)}(Q,t) = -i\hat{L}f^{(N)}(Q,t).$$

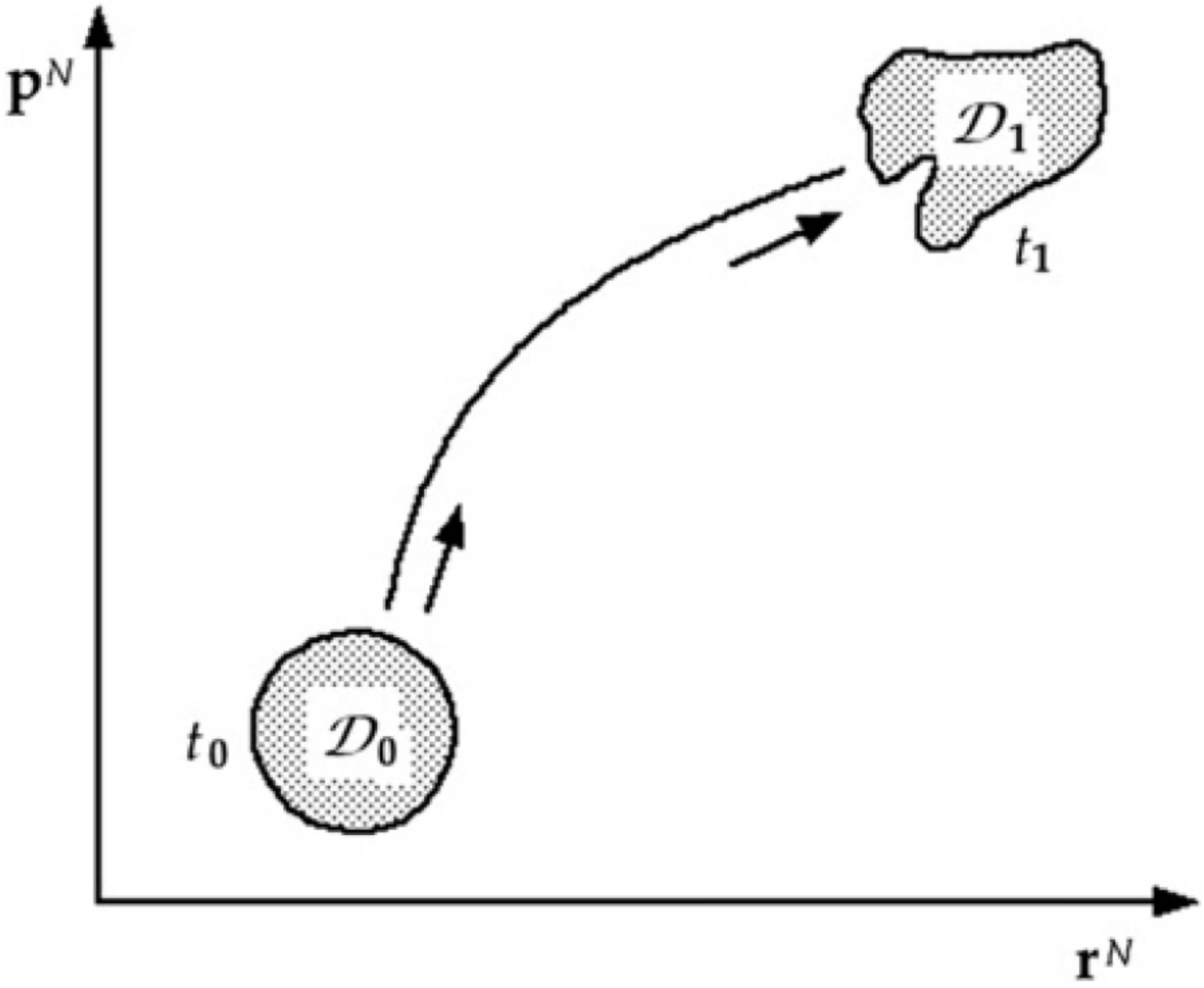


FIGURE 2.1 Conservation of volume in phase space. The phase points contained in the region $\mathcal{D}_0$ at a time $t = t_0$ move along their phase space trajectories in the manner prescribed by Hamilton's equations to occupy the region $\mathcal{D}_1$ at $t = t_1$. The Liouville theorem shows that the two regions have the same volume.

Сохранение фазового объема

Рассмотрим траекторию малого пятна (множества точек) в фазовом пространстве. Перемещаясь вдоль множества траекторий, пятно растягивается в одной координате, скажем — p_i — но сжимается по другой координате q_i так, что произведение $\Delta p_i \Delta q_i$ остаётся константой. Площадь пятна (фазовый объём) не изменяется.

Более точно, фазовый объём Γ сохраняется при сдвигах времени. Если

$$\int_{\Gamma} dp^N dq^N = C,$$

и $\Gamma(t)$ — множество точек фазового пространства, в которое может эволюционировать множество Γ в момент времени t, тогда

$\int_{\Gamma(t)} dp^N dq^N = C$ для всех времён t. Объём фазового пространства гамильтоновой системы сохраняется, поскольку эволюция во времени в гамильтоновой механике -- это каноническое преобразование, а все канонические преобразования имеют единичный якобиан.

Сохранение фазового объема

$$\frac{\mathrm{df}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial f}{\partial t}+\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial r_i}\frac{\mathrm{dr}_i}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial \rho}{\partial p_i}\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}\right)=\frac{\partial f}{\partial t}+\left\{f,H\right\}=0.$$

Возьмем объем фазового пространства. В этом объеме f=1, вне объема f=0. Тогда

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Gamma} f dp^N dq^N = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Gamma} dp^N dq^N = 0.$$

О распределении Гиббса

В термодинамическом равновесии,

$$\left\{ f^{(N)}(Q,t), H(Q,t) \right\} = 0.$$

В термодинамическом равновесии,

$$f^{(N)}(Q,t) = f^{(N)}\left[H \right]$$

$$f_{eq}^{(N)}(Q,t) = f^{(N)}\left[H\right]$$

Функция распределения (ФР) термодинамической системы должна быть аддитивна: разделили систему на две части, ФР должна быть равна произведению ФР частей…

Тогда Log(ФР) – линейная комбинация интегралов движения:

$$\ln\left(f_{eq}^{(N)}(Q,t)\right) = const - \beta H(Q)$$

А это распределение Гиббса…

Уравнения для редуцированных функций распределения

Theory of Simple Liquids (Fourth Edition)

With Applications to Soft Matter

Jean-Pierre Hansen, Ian R. McDonald

2013

Chapter 2

https://doi.org/10.1016/B978-0-12-387032-2.00001-5

Редуцированная многочастичная функция распределения (для системы тождественных частиц)

$$f^{(n)}(r^n, p^n, t) = \frac{N!}{(N-n)!} \iint f^{(N)}(r^N, p^N, t) dr^{(N-n)} dp^{(N-n)}$$

Число способов выбрать
N-n координат…

Тождественность частиц означает симметрию ФР по перестановке индексов координат и импульсов.

Кинетическое уравнение для $f^{(n)}$

Рассмотрим специальный случай, когда полня сила, действующая на частицу с номером i, равна сумме потенциальной внешней силы $\mathbf{X}_i = -\frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{r}_i}$ и силы парного взаимодействия с другими частицами $\mathbf{F}_{ij}$, $\mathbf{F}_{ii} = 0$. Тогда второй закон Ньютона и ур. Лиувилля:

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^{N} \mathbf{F}_{ij}$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{X}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right) f^{(N)} = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} F_{ij} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i}}$$

Умножим обе части на $\frac{N!}{(N-n)!}$ и проинтегрируем по $3(N-n)$ координатам и импульсам:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{N}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{N}\mathbf{X}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(N)}=-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\mathbf{F}_{ij}\frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{X}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(n)}=-\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{F}_{ij}\frac{\partial f^{(n)}}{\partial \mathbf{p}_i}-$$
$$-\frac{N!}{(N-n)!}\iint\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=n+1}^{N}\mathbf{F}_{ij}\frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i}d\mathbf{r}^{(N-n)}d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

Тождественность частиц означает симметрию ФР по перестановке индексов координат и импульсов:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{X}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(n)}=-\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{F}_{ij}\frac{\partial f^{(n)}}{\partial \mathbf{p}_i}-$$

$$-\frac{N!}{(N-n)!}\iint\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=n+1}^{N}\mathbf{F}_{ij}\frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i}d\mathbf{r}^{(N-n)}d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{X}_i+\sum_{j=1}^{n}\mathbf{F}_{ij}\right)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(n)}=-\iint\sum_{i=1}^{n}\mathbf{F}_{i,n+1}\frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i}d\mathbf{r}_{n+1}d\mathbf{p}_{n+1}$$

Уравнение Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда

Выводы:

хорошая новость: Можно получить точное кинетическое уравнение для многочастичной функции распределения, но!!!

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{X}_i+\sum_{j=1}^{n}\mathbf{F}_{ij}\right)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(n)}=-\iint\sum_{i=1}^{n}\mathbf{F}_{i,n+1}\frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i}d\mathbf{r}_{n+1}d\mathbf{p}_{n+1}}$$

Уравнение Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда

Плохая новость:

Чтобы решить это уравнение, надо знать ФР высшего порядка и решить всю цепочку уравнений во всех порядках…

Наиболее практически важный случай, n=1

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{i=1}^{n}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}+\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{X}_i+\sum_{j=1}^{n}\mathbf{F}_{ij}\right)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(n)}=-\iint\sum_{i=1}^{n}\mathbf{F}_{i,n+1}\frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i}d\mathbf{r}_{n+1}d\mathbf{p}_{n+1}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}+\mathbf{X}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}\right)f^{(1)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1,t)=-\iint\mathbf{F}_{1,2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}f^{(2)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)d\mathbf{r}_2d\mathbf{p}_2$$

Это и есть уравнение типа «Больцмана», только точное, без приближений. Из правой части можно получить интеграл столкновений и силу трения, после усреднения по малым масштабам…

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}+\mathbf{X}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}\right)f^{(1)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1,t)=-\iint \mathbf{F}_{1,2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}f^{(2)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}+\mathbf{X}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}},$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}=\Gamma_{in}-\Gamma_{out}=-\left\langle \iint \mathbf{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}f^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)d\mathbf{r}'d\mathbf{p}'\right\rangle_{\text{small scales}}$$

Упражнение:
интеграл столкновений написан неверно. Найти ошибку.
Скорректировать формулу.

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \frac{1}{m}\iint \sigma(\Omega, \Delta p)[f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1'; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2'; t) - f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t) f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2; t)]\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}\mathbf{p}_2 \tag{2.1.25}$$

where $\Delta p \equiv |\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|$ and $\sigma(\Omega, \Delta p)$ is the differential cross-section for scattering into a solid angle $\mathrm{d}\Omega$. As Boltzmann showed, this form of the collision term is able to account for the fact that many-particle systems evolve irreversibly towards an equilibrium state. That irreversibility is described by Boltzmann's H-theorem; its source is the assumption of molecular chaos.

Приближение слабых корреляций. Уравнения Власова.

Приближение слабых корреляций

$$f^{(2)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)\approx f^{(1)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;t)f^{(1)}(\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}+\mathbf{X}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=-\iint \mathbf{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}f^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)d\mathbf{r}'d\mathbf{p}'$$

(Бестолкновительное) уравнения Власова

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}+\left[\mathbf{X}+\overline{\mathbf{F}}\right]\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=0,$$

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{r},t)=\int \mathbf{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)f(\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)d\mathbf{r}'d\mathbf{p}'.$$

DISCUSSION

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}+\left[\mathbf{X}+\overline{\mathbf{F}}\right]\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right)f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=0,$$

$$\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{r},t)=\int \mathbf{F}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)f(\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)d\mathbf{r}'d\mathbf{p}'.$$

- $\overline{\boldsymbol{F}}$ является средней силой, оказываемой другими частицами, расположенными в точках **r**, на частицу, которая в момент времени t находится в точке **r’**; это приближение классического типа среднего поля.
- Хотя уравнение Власова явно не подходит для жидкостей, оно широко используется в физике плазмы, где дальнодействующий характер кулоновского потенциала оправдывает обработку взаимодействий в среднем поле.
- Приближение слабых корреляций становится точным асимптотически, когда $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty$. Таким образом, применение этого приближения ФАКТИЧЕСКИ подразумевает «угрубление» – «усреднение» по «малым» масштабам.

DISCUSSION

Принцип ослабления корреляций (для газов)

$$f^{(2)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)\xrightarrow[|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\to\infty]{} f^{(1)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;t)\,f^{(1)}(\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t)$$

- Используя принцип ослабления корреляций и расцепление кинетического уравнения для $f^{(2)}$, можно получить столкновительный член в уравнении больцмана:

$$\mathrm{St}\, f = \int w'(f'f_1' - f f_1)\, d\Gamma_1\, d\Gamma'\, d\Gamma_1';$$

- В качестве литературы можно использовать 3-ий том учебника Квасникова «Теория неравновесных систем».
- Студент может подготовить презентацию на 10 мин. с подробным выводом. За это можно будет не писать контрольную...

Тепловой Баланс. Феноменология.

Принцип локального равновесия

- обобщение результатов равновесной термодинамики на неравновесный случай

$$f(r,p,t) \approx \frac{1}{\exp\left[\dfrac{\varepsilon(p)-\mu(r,t)}{T(r,t)}\right]+1}$$

$$\boxed{\left| l\frac{dT}{dr} \right| \ll T}$$

l -- длина свободного пробега

Уравнение баланса энтропии и законы сохранения

- уравнение термодинамики для физически малых объемов системы

$$dE(r,t) = T(r,t)dS(r,t) + \mu(r,t)dn(r,t)$$

$$dS(r,t) = \frac{dE(r,t)}{T(\mathrm{r},t)} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)}dn(r,t)$$

$$\frac{dS(r,t)}{dt} = \frac{1}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dE(r,t)}{dt} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dn(r,t)}{dt}$$

$$\frac{dS(r,t)}{dt} = \frac{1}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dE(r,t)}{dt} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dn(r,t)}{dt}$$

План:

At the end of the day…

Поток тепла

Электрический ток

Электрическое поле

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} + \mathrm{div}(\mathbf{J}_s) = -\mathbf{J}_Q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} + \mathbf{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{T}$$

$$\frac{dS(r,t)}{dt} = \frac{1}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dE(r,t)}{dt} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)}\frac{dn(r,t)}{dt}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\mathrm{r},t)}\frac{\partial E(r,t)}{\partial t} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)}\frac{\partial n(r,t)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\mathrm{r},t)} \boxed{\frac{\partial E(r,t)}{\partial t}} - \frac{\mu(r,t)}{T(\mathrm{r},t)} \boxed{\frac{\partial n(r,t)}{\partial t}}$$

Точное соотношение:

$$\frac{dn(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{J}_n = 0,$$

Закон, нуждающийся в уточнении условий применимости:

$$\frac{dE(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div} \vec{J}_E = 0,$$

DISCUSSION

Нам надо получить законы сохранения числа частиц и энергии, чтобы разобраться с энтропией (теплом).

Законы сохранения числа частиц и энергии в кинетическом уравнении

1. Закон сохранения числа частиц

Упражнение. Закон сохранения числа частиц (феноменологический вывод)

$$n(r,t) = \sum_i \delta\left(r - r_i(t)\right)$$

$$\frac{\partial n(r,t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{dr_i(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial r}\delta\left(r - r_i(t)\right) = -\sum_i \vec{\mathrm{v}}_i(t)\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\delta\left(r - r_i(t)\right) = -\mathrm{div}\left(\mathbf{J}\right)$$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\mathbf{J}\right) = 0, \quad \mathbf{J} = \sum_i \vec{\mathrm{v}}_i(t)\delta\left(\vec{r} - \vec{r}_i(t)\right) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{r},\vec{p},t)\vec{v}(\vec{p})$$

Закон сохранения числа частиц в кинетическом уравнении должен выполняться всегда… Проверим.

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r,p,t) + \frac{\partial}{\partial r}\big(\mathrm{v}(p) f(r,p,t)\big) + \frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t) f(r,p,t)\big) =$$
$$= \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}\big(W(p\,|\,p') f(r,p',t) - W(p'\,|\,p) f(r,p,t)\big).$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(r,p,t)\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \frac{\partial}{\partial r}\big(\mathrm{v}(p) f(r,p,t)\big)\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t) f(r,p,t)\big)\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} =$$
$$= \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\big(W(p\,|\,p') f(r,p',t) - W(p'\,|\,p) f(r,p,t)\big).$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}+\int\frac{\partial}{\partial r}\big(\mathrm{v}(p)f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}+\int\frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t)f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=$$

$$=\int\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\big(W(p\,|\,p')f(r,p',t)-W(p'\,|\,p)f(r,p,t)\big).$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\frac{\partial}{\partial t}n(r,t)$$

$$\int\frac{\partial}{\partial r}\big(\mathrm{v}(p)f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\mathrm{div}\big(\mathbf{J}\big)$$

$$\int\frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t)f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\int F(r,t)f(r,p,t)dS_p=0$$

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\Big(W(p\,|\,p')f(r,p',t)-W(p'\,|\,p)f(r,p,t)\Big)=?$$

При столкновениях меняется только импульс!!! Координата фиксирована.
Сделаем во втором интеграле замену переменных: p заменим на p’, и p’ заменим на p.
Тогда немедленно получим:

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\Big(W(p\,|\,p')f(r,p',t)-W(p'\,|\,p)f(r,p,t)\Big)=0$$

ВЫВОД:

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t}+\mathrm{div}\big(\mathbf{J}\big)=0,\quad \mathbf{J}=\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}f(\vec{r},\vec{p},t)\vec{\mathrm{v}}(\vec{p})$$

Выводы: общее свойство любого интеграла столкновений:

Обозначим: $$d\Gamma = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\boxed{I_{cl} = \int d\Gamma'\big(W(p\,|\,p')f(r,p',t) - W(p'\,|\,p)f(r,p,t)\big).}$$

$$\boxed{\int d\Gamma I_{cl} = 0}$$

2. Закон сохранения энергии в кинетическом уравнении

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r,p,t) + \frac{\partial}{\partial r}\big(\mathrm{v}(p) f(r,p,t)\big) + \frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t) f(r,p,t)\big) = \left(\frac{\partial}{\partial t} f\right)_{scat}$$

$$\boxed{E(r,t) = \int \varepsilon(p) f(r,p,t) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \varepsilon(p) f(r,p,t) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} + \int \frac{\partial}{\partial r}\big(\varepsilon(p)\, \mathrm{v}(p) f(r,p,t)\big)\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} +$$

$$+\int \varepsilon(p) \frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t) f(r,p,t)\big)\frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \int \varepsilon(p)\left(\frac{\partial}{\partial t} f\right)_{scat} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

$$\boxed{E(r,t)=\int \varepsilon(p) f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\int \varepsilon(p) f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}+\int\frac{\partial}{\partial r}\big(\varepsilon(p)\,\mathrm{v}(p) f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}+\\&+\int \varepsilon(p)\frac{\partial}{\partial p}\big(F(r,t) f(r,p,t)\big)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=\int\varepsilon(p)\left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{scat}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.\end{aligned}}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}E(r,t)+\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\mathbf{j}_E-\mathbf{F}(r,t)\cdot\mathbf{j}=\int\varepsilon(p)\left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{scat}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.}$$

Итак, мы получили, что

$$\frac{\partial}{\partial t}E(r,t)+\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot\mathbf{j}_E-\mathbf{F}(r,t)\cdot\mathbf{j}=\int\varepsilon(p)\left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{scat}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

$$E(r,t)=\int\varepsilon(p)f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$\mathbf{j}_E=\int\varepsilon(p)\mathbf{v}(p)f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},\qquad \mathbf{j}=\int\mathbf{v}(p)f(r,p,t)\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

$$\int\varepsilon(p)\left(\frac{\partial}{\partial t}f\right)_{scat}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}=0,$$ если парные столкновения,

упругие столкновения с примесями,... Это проверим, потом...

Закон сохранения (плотности) энергии. Вычислим другим способом.

$$\mathrm{E}(\mathrm{r},\mathrm{t})=\sum_i \varepsilon(p_i(t))\delta\left(r-r_i(t)\right)=\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\mathbf{p})f(\mathbf{p},\mathbf{r},t),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}E(\mathrm{r},\mathrm{t})=\sum_i \mathrm{v}(p_i(t))\left(\frac{\partial}{\partial t}p_i(t)\right)\delta\left(r-r_i(t)\right)-\sum_i \varepsilon(p_i)\left(\frac{\partial}{\partial t}r_i(t)\right)\frac{\partial}{\partial r}\delta\left(r-r_i(t)\right)=$$

$$=\sum_i \mathrm{v}(p_i(t))F_i\delta\left(r-r_i(t)\right)-\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\left[\sum_i \varepsilon(\mathbf{p}_i)\mathbf{v}_i(t)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i(t)\right)\right]=\sum_i \mathrm{v}(p_i(t))F_i\delta\left(r-r_i(t)\right)-\mathrm{div}\,\mathbf{J}_E,$$

$$\mathbf{J}_E=\sum_i \varepsilon(\mathbf{p}_i)\mathbf{v}_i(t)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i(t)\right)=\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\mathbf{p})\mathbf{v}(\mathbf{p})f(\mathbf{p},\mathbf{r},t).$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}E(\mathrm{r},\mathrm{t})+\mathrm{div}\,\mathbf{J}_E=-\mathbf{F}_{ext}\cdot\mathbf{j}.}$$

CONCLUSIONS

$$\frac{\partial}{\partial t}E(r,t)+\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot \mathbf{j}_E-\mathbf{F}_{ext}(r,t)\cdot \mathbf{j}=0.$$

- Если столкновения молекул друг с другом, упругие столкновения с тяжелыми примесями,…

Кинетика тепла

«Закон сохранения» тепла

- Поток тепла?
- Можно ли теплу (потоку тепла) сопоставить квантовый оператор?

$$dE(r,t) = T(r,t)dS(r,t) + \mu(r,t)dn(r,t)$$

$$T(r,t)\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}E(r,t) - \mu(r,t)\frac{\partial}{\partial t}n(r,t).$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}E(r,t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot \mathbf{j}_E + \mathbf{E}_e\cdot \mathbf{j}_e.}$$

$$\boxed{\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(\mathbf{J}_e\right)/e.}$$

$$T(r,t)\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}E(r,t) - \mu(r,t)\frac{\partial}{\partial t}n(r,t) =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot \mathbf{j}_E + \mathbf{E}_e\cdot \mathbf{j}_e + \mu(r,t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot \mathbf{J}_e / e = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot\left(\mathbf{j}_E - \frac{\mu(r,t)}{e}\mathbf{J}_e\right) + \left(\mathbf{E}_e - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\mu(r,t)}{e}\right)\cdot \mathbf{j}_e =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\cdot \mathbf{j}_Q + \boldsymbol{\varepsilon}\cdot \mathbf{j}_e.$$

CONCLUSIONS

$$\frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_Q = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}_e ,$$

$$\mathbf{j}_Q = \mathbf{j}_E - \frac{\mu(r,t)}{e} \mathbf{J}_e ,$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathsf{E}_{ext} - \nabla \mu / \mathrm{e}.$$

Производство энтропии

Уравнение баланса энтропии и законы сохранения

Поток тепла

Электрический ток

Электрическое поле

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} + \mathrm{div}(\mathbf{J}_s) = -\mathbf{J}_Q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} + \mathbf{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{T}$$

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{J}_S = \mathbf{J}_Q \cdot \nabla\left[\frac{1}{T(r,t)}\right] + \mathbf{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{T(r,t)},$$

$$\mathbf{J}_S = \mathbf{J}_Q / T(r,t).$$

Подведем итоги

$$\frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_Q = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}_e,$$

$$\mathbf{j}_Q = \mathbf{j}_E - \frac{\mu(r,t)}{e} \mathbf{J}_e,$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathrm{E}_{ext} - \nabla \mu / \mathrm{e}.$$

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_S = \mathbf{J}_Q \cdot \nabla \left[\frac{1}{T(r,t)} \right] + \mathbf{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{T(r,t)},$$

DISCUSSION

Уравнение теплопроводности

$$\boxed{\frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_e \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \text{irradiation} + (\text{bla-bla-bla}) \equiv \dot{\mathrm{q}}_V}$$

$$\mathbf{J}_Q(r,t) = -\kappa(r,t)\nabla T(r,t)$$

коэффициент теплопроводности

$$\delta Q(r,t) = \rho c_P \delta T(r,t)$$

теплоемкость

$$\boxed{\rho c_P \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\kappa \nabla T\right) = \dot{\mathrm{q}}_V}$$

Уравнение теплопроводности

$$\mathbf{J}_Q(r,t) = -\kappa(r,t)\nabla T(r,t) \qquad \delta Q(r,t) = \rho c_P \delta T(r,t)$$

коэффициент теплопроводности

теплоемкость

$$\boxed{\rho c_P \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} - \mathrm{div}\left(\kappa \nabla T\right) = \dot{\mathrm{q}}_V}$$

Потери тепла на излучения (закон Стефана-Больцмана)
единицы площади абсолютно черного тела в единицу времени:

$$j^{\star} = \sigma T^4. \qquad \dot{\mathrm{q}}_V\,(\textit{излучение}) \propto -(T^4 - T_\infty^4).$$

Поток тепла и кинетическое уравнение

$$\boxed{\mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_E - \mu \mathbf{J} = \mathbf{J}_E - (\mu / e)\mathbf{J}_e.}$$

$$\boxed{\begin{aligned}
&\mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_E - \mu \mathbf{J} = \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\mathrm{p})\,\vec{\mathrm{v}}(\mathrm{p})\,\mathrm{f}(\mathrm{r},\mathrm{p},\mathrm{t}) - \mu \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{\mathrm{v}}(\mathrm{p})\,\mathrm{f}(\mathrm{r},\mathrm{p},\mathrm{t}) = \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \big(\varepsilon(\mathrm{p}) - \mu\big) \vec{\mathrm{v}}(\mathrm{p})\,\mathrm{f}(\mathrm{r},\mathrm{p},\mathrm{t}).
\end{aligned}}$$

Поток тепла и кинетическое уравнение

$$\mathbf{J}_Q = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left(\varepsilon(\mathrm{p}) - \mu\right)\vec{\mathrm{v}}(\mathrm{p})\,\mathrm{f}(\mathrm{r},\mathrm{p},\mathrm{t}).$$

├ Спектр ε(p) определен с точностью до константы — начала отсчета энергии.
Если сделать «калибровочное преобразование» ε(p) -->ε(p)+h_0,
то поток тепла измениться не должен, если он правильно определен.

При таком преобразовании, μ-> μ+h_0. Поэтому, действительно, $\mathbf{J}_Q$ инвариантно…

Напоминаю, как в курсе статфизики вы находили химпотенциал идеальных газов:

$$n = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon(p)-\mu}{T}\right)\pm 1}.$$

Поток тепла и кинетическое уравнение
Выводы:

$$\boxed{\mathbf{J}_Q = \mathbf{J}_E - \mu \mathbf{J} = \mathbf{J}_E - (\mu / e)\mathbf{J}_e.}$$

$$\boxed{\mathbf{J}_Q = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\left(\varepsilon(\mathrm{p}) - \mu\right)\vec{\mathrm{v}}(\mathrm{p})\,\mathrm{f}(\mathrm{r},\mathrm{p},\mathrm{t}).}$$

Спасибо за внимание!