УВОД

ГАМА ФУНКЦИЈА

$0! = 1$

$1! = 1$

$2! = 2\cdot 1 = 2$

$3! = 3\cdot 2\cdot 1 = 6$

$\left(\frac{1}{2}\right)! \overset{?}{=} \sqrt{\pi}$

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1} e^{-x}\,dx \qquad n \in \mathbb{R}$$

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

$$\Gamma(n+1) = n\cdot\Gamma(n)$$

$$\Gamma\left(\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) = \tfrac{1}{2}\Gamma\left(\tfrac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right) = \tfrac{3}{2}\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right) = \tfrac{3}{2}\cdot\tfrac{1}{2}\cdot\Gamma\left(\tfrac{1}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$$

ПРИМЕР израчунати интеграл $\int_0^\infty x^3 e^{-2x}\,dx$

$$I = \int_0^\infty x^3 e^{-2x}\,dx = \left\{ \begin{array}{l} 2x = t \\ dx = \frac{dt}{2} \end{array} \right\} = \int_0^\infty \frac{t^3}{8} e^{-t}\frac{dt}{2} = \frac{1}{16}\Gamma(4) = \frac{3!}{16} = \frac{3}{8}$$

Стирлингова апроксимација $\ln N! \approx N\ln N - N$ важи за велико N

Доказ: полазимо од гама функције $N! = \int_0^\infty e^{-x}x^N\,dx = \int_0^\infty e^{N\ln x - x}\,dx$

Да би апроксимирали овај интеграл искористимо методу превојне тачке.

Ако имамо интеграл $I = \int_a^b e^{-Ng(x)}\,dx$, он се може апроксимирати за велико N на следећи начин. Нека функција $g(x)$ има минимум у интервалу $[a,b]$. Развијмо је у Тејлоров ред: $g(x) = g(x_0) + \frac{1}{2}g''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$ где је x_0 вредност минимума.

Заменом овог развоја у интеграл добијамо $I = \int_a^b e^{-Ng(x_0) - \frac{Ng''(x_0)(x-x_0)^2}{2} + \dots}\,dx$

$$\approx e^{-Ng(x_0)}\int_a^b e^{-\frac{Ng''(x_0)(x-x_0)^2}{2}}\,dx = \left\{ \begin{array}{l} x - x_0 = y \\ dx = dy \end{array} \right\} \approx e^{-Ng(x_0)}\int_{a-x_0}^{b-x_0} e^{-\frac{Ng''(x_0)y^2}{2}}\,dy$$

$$\approx e^{-Ng(x_0)}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-Ng''(x_0)y^2}{2}}\,dy \approx e^{-Ng_0(x_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{Ng''(x_0)}}$$

Да би применили метод превојне тачке на гама функцију приметимо да је

$$g(x) = -\ln x + \frac{x}{N}$$

$$g'(x) = -\frac{1}{x} + \frac{1}{N} \qquad g'(x) = 0 \Rightarrow x = N$$

$$g''(x) = \frac{1}{x^2}$$

$$N! \approx e^{-N(-\ln N + 1)}\sqrt{\frac{2\pi}{N\frac{1}{N^2}}} \approx e^{N\ln N - N}\sqrt{2\pi N} \Rightarrow \ln N! \approx N\ln N - N + \ln\sqrt{2\pi N}$$

За велико N довољно је узети $N! \approx N\ln N - N$

ДЕЛТА ФУНКЦИЈА

(*) Није функција него дистрибуција јер функције не могу пресликати број у бесконачну вредност (нпр. $f(x) = \frac{1}{x},\ x \neq 0$)

особине: $\delta(x) = \delta(-x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)f(x)\,dx = f(0)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & x = 0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases}$$

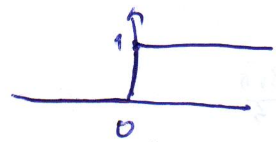
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}$$, x_i су решења једначине $g(x)=0$

на пример: $\delta(x^2-x_0^2) = \frac{1}{2|x_0|}\left(\delta(x+x_0)+\delta(x-x_0)\right)$

Тета функција

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



особине:

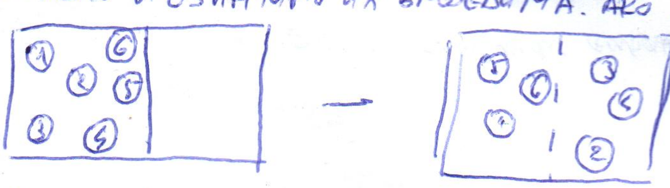
$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx}$$

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta(s)\,ds$$

Статистичка термодинамика

Како се могу одредити термодинамичке величине?
Како су повезана макроскопска мерења и молекулско кретање?
На који начин можемо вршити предвиђања у вези молекулског кретања?
Како ћемо одредити вероватноће микростања?
Каква је природа ентропије?
Да ли Максвелова расподела брзина важи за реалне гасове?
Који је утицај механичког рада и топлоте на молекулско кретање?
Зашто на ниским температурама материја показује другачије особине у односу на високе температуре?
Зашто пара и врло водоник имају различите термодинамичке особине?
Шта је заправо „тешко" у статистичкој термодинамици?

Нека имамо N куглица у левој прегради неке кутије. Сваку куглицу можемо да разликујемо и означимо их бројевима. Ако у неком тренутку нестане преграда и добро промешамо кутију тако да постане подједнако вероватно да се свака куглица нађе у левој или десној прегради, колико износи (очекивани) број куглица у левој прегради?



Макростање система - разлике на макронивоу - број куглица у левој (десној) прегради
Микростање система - детаљна конфигурација на микроскопском нивоу - где се свака куглица налази

1 2 3 4 5 6
Л Л Д Д Д Л - микростање

Вероватноћа да се куглица налази у левој прегради $= \frac{1}{2}$

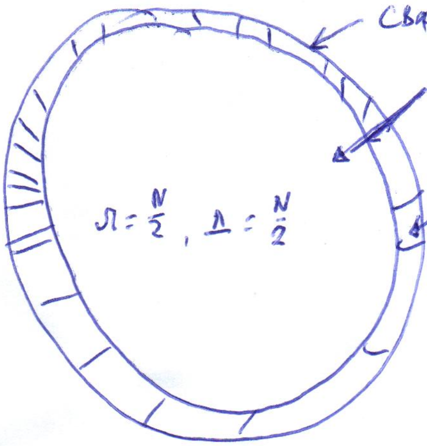
Вероватноћа микростања $= \frac{1}{2^N}$ = сва микростања имају подједнаку вероватноћу

Вероватноћа макростања = K куглица се налази у левој прегради $= \frac{\text{број начина да распоредимо } K \text{ куглица од } N \text{ лево}}{2^N} = \frac{\binom{N}{K}}{2^N}$

$\binom{N}{K} = \frac{N!}{(N-K)!\,K!}$ биномни коефицијент

1
1 1
1 2 1
1 3 3 1

Када је N јако велики број, убедљиво највећа вредност биномног коефицијента биће за $k = \frac{N}{2}$. Све остале вредности биће знатно мање. Дакле, за велики број куглица, највероватније макростање ће бити за $k = \frac{N}{2}$. Тај број представља и очекивану вредност куглица у левој половини кутије.



Сва микростања

Највероватније макростање

Друга макростања

нпр: $\Omega = \frac{N}{2} - 100$, $\Delta = \frac{N}{2} + 100$

Приметимо да ако наставимо да мешамо куглице, понекад ћемо налазити и друга макростања.

Болцман је узео у разматрање само највероватније макростање да би за систем неинтерагујућих честица извео Болцманову расподелу. Ентропија је повезана са бројем микростања које одговарају макростању. Гибс је узео у обзир сва макростања. Он је одредио вероватноће микростања када систем није изолован него интерагује са резервоаром (метод ансамбла). Његов метод важи за систем интерагујућих честица.