

MIT Açık Ders Malzemeleri

<http://ocw.mit.edu>

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

Bu materyallerden alıntı yapmak veya Kullanım Şartları hakkında bilgi almak için

<http://ocw.mit.edu/terms> ve <http://tuba.acikders.org.tr>

sitesini ziyaret ediniz.

III.E H–Teoremi ve Tersinmezlik

Bu bölümün başında ortaya konan ikinci soru, bir parçacık topluluğunun doğal olarak bir denge durumuna doğru evrilip evrilmeyeceğiydi. Tam faz uzayı yoğunluğu ρ_N için durağan durum çözümleri elde etmek mümkün olsa da, zamanda tersinme simetrisi nedeniyle bu çözümler, genel denge dışı yoğunlukların çekim noktası değildir. Koşulsuz tek parçacık OYF ρ_1 de aynı problemten muzdarip midir? Kesin yoğunluk ρ_1 , zorunlu olarak ρ_N 'in bu özelliğini yansıtsa da, H-teoremi, Boltzmann denkleminin tanımladığı yaklaşık ρ_1 , gerçekten de tersinmez olarak bir denge biçimine ulaşır. Bu teoremin ifadesi şöyledir:

• Eğer $f_1(\vec{p}, \vec{q}, t)$ Boltzmann denklemini sağlıyorsa, o zaman $dH/dt \leq 0$, öyle ki,

$$H(t) = \int d^3\vec{p} d^3\vec{q} f_1(\vec{p}, \vec{q}, t) \ln f_1(\vec{p}, \vec{q}, t) . \quad (\text{III.42})$$

$H(t)$ fonksiyonu, tek parçacık OYF'nin bilgi içeriğiyle ilişkilidir. Genel bir sabite kadar, $\rho_1 = f_1/N$ 'nin bilgi içeriği, açıkça $H(t)$ 'ye benzer şekilde, $I[\rho_1] = \ln \rho_1$ ile verilir.

İspat: H'nin zamana göre türevi şöyledir

$$\frac{dH}{dt} = \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 \frac{\partial f_1}{\partial t} (\ln f_1 + 1) = \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 \ln f_1 \frac{\partial f_1}{\partial t} , \quad (\text{III.43})$$

çünkü $\int dV_1 f_1 = N \int d\Gamma \rho = N$ zamandan bağımsızdır. Denklem (III.41)'i kullanarak şunu elde ederiz,

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 \ln f_1 \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{q}_1} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{q}_1} \right) \\ &- \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 d^3\vec{p}_2 d^2\sigma |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [f_1(\vec{p}_1, \vec{q}_1) f_1(\vec{p}_2, \vec{q}_1) - f_1(\vec{p}_1', \vec{q}_1) f_1(\vec{p}_2', \vec{q}_1)] \ln f_1(\vec{p}_1, \vec{q}_1), \end{aligned} \quad (\text{III.44})$$

burada, differensiyel kesit için $d^2\sigma$, d^2b , veya $d^2\Omega |d\sigma/d\Omega|$ terimlerini birbirinin yerine kullanacağız. Yukarıdaki ifadede akan terimler, ardışık kısmi türevlerle gösterildiği gibi sıfırdır,

$$\int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 \ln f_1 \frac{\partial U}{\partial \vec{q}_1} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = - \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 f_1 \frac{\partial U}{\partial \vec{q}_1} \cdot \frac{1}{f_1} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 f_1 \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{q}_1} = 0,$$

ve

$$\int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 \ln f_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{q}_1} = - \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 f_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{1}{f_1} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{q}_1} = \int d^3\vec{p}_1 d^3\vec{q}_1 f_1 \frac{\partial}{\partial \vec{q}_1} \cdot \frac{\vec{p}_1}{m} = 0.$$

Denklem (III.44)'deki çarpışma terimi, \vec{p}_1 ve \vec{p}_2 değişkenleri üzerinden integralleri içerir. Dolayısıyla (1) ve (2) etiketleri, integralin değerini değiştirmeden yer değiştirebilir. İki sonuç ifadesinin ortalaması şunu verir:

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2} \int d^3\vec{q}d^3\vec{p}_1d^3\vec{p}_2d^2\vec{b}|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2) - f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2')] \ln(f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2)). \quad (\text{III.45})$$

(f_1 'in \vec{q} ve t değişkenleri gösterim kolaylığı için yazılmamıştır.) Şimdiki amacımız, integral değişkenlerini, çarpışmanın öncesini tanımlayan $(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{b})$ 'den, sonrasını tanımlayan $(\vec{p}_1', \vec{p}_2', \vec{b}')$ 'ye değiştirmektir. Bu dönüşümü tanımlayan açık fonksiyonel biçimler, denklem (III.39)'daki katı aç $\hat{\Omega}$ 'nın \vec{b} ve $|\vec{p}_2 - \vec{p}_1|$ 'ye bağımlılığı yüzünden karmaşıktır. Yine de, dönüşümün Jacobiyeninin bir olduğundan, zamanda tersinme simetrisi nedeniyle emin olabiliriz; çünkü her çarpışma için, sonuç momentumlarını tersine çevirerek elde edilen bir tersi vardır. Yeni koordinatlar cinsinden,

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2} \int d^3\vec{q}d^3\vec{p}_1'd^3\vec{p}_2'd^2\vec{b}'|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2) - f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2')] \ln(f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2)), \quad (\text{III.46})$$

ki bu denklemde artık, (\vec{p}_1, \vec{p}_2) 'yi denklem (III.39)'daki gibi, integral değişkenleri $(\vec{p}_1', \vec{p}_2', \vec{b}')$ 'nin fonksiyonları olarak görmeliyiz. Daha önce belirtildiği gibi, tüm esnek çarpışmalarda $|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = |\vec{v}_1' - \vec{v}_2'|$ ve bu değişkenleri birbirinin yerine kullanabiliriz. Son olarak, integral alınan değişkenlerindeki tırnak işaretlerini kaldıralım. $(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{b})$ 'nin $(\vec{p}_1', \vec{p}_2', \vec{b}')$ 'ye fonksiyonel bağımlılığının tersi için de tam olarak aynı olduğunu hatırlarsak, şunu elde ederiz:

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2} \int d^3\vec{q}d^3\vec{p}_1d^3\vec{p}_2d^2\vec{b}|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2') - f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2)] \ln(f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2')). \quad (\text{III.47})$$

Denklem (III.45) ve (III.47)'nin ortalamasını aldığımızda sonuç,

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \int d^3\vec{q}d^3\vec{p}_1d^3\vec{p}_2d^2\vec{b}|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2) - f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2')] [\ln(f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2)) - \ln(f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2'))]. \quad (\text{III.48})$$

Yukarıda, integrali alınan ifade her zaman pozitifdir. Eğer ise köşeli parantez içindeki $f_1(\vec{p}_1)f_1(\vec{p}_2) > f_1(\vec{p}_1')f_1(\vec{p}_2')$ her iki terim pozitifdir, tersi olduğunda ise her ikisi de negatiftir. Her durumda çarpımları pozitif verir. İntegrandın pozitif olması, H-teoremini geçerli kılar:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad . \quad (III.49)$$

• *Tersinmezlik*: İkinci yasa, zamanın bir *yönü* olduğunu destekleyen çok sayıdaki günlük hayattaki gözlemlerin *deneyime bağlı* bir formülasyonudur. Mikroskopik dünyayı yöneten fizik yasalarının tersinir oluşuyla, makroskopik olguların gözlenen tersinmezliğini bağdaştırmak temel bir problemdir. Elbette, fiziğin mikroskopik yasalarının tümü tersinir değildir: zayıf çekirdek etkileşmeleri zamanda tersinme simetrisini ihlal eder, ve gözlem anında kuantum dalga fonksiyonunun çöküşü tersinmezdir. Zayıf etkileşmeler, ikinci yasaya yol açan günlük deneyimlerde, aslında hiçbir önemli rol oynamaz. Dalga fonksiyonunun tersinmez çöküşünün kendisi ise, makroskopik gözlemciler ile mikroskopik gözlenenleri ayırık olarak ele almanın yapay bir sonucu olabilir.[†] Bugün için kabul edilen mikroskopik hareket denklemlerindeki (klasik veya kuantum) tersinirliğin, yetersizliklerinin göstergesi olduğu görüşünü savunanlar vardır. Ancak, güçlü bilgisayarların gelişimi, *klasik, tersinir* hareket denklemleriyle yönetilen çok sayıda parçacıktan oluşan toplulukların evriminin benzetimini yapmayı mümkün kıldı. Benzetimler, halen görece küçük parçacık sayılarıyla (10^6) sınırlı olsa da, doğada gözlenenlere (tipik olarak 10^{23} parçacık içeren) benzer olarak, tersinmez makroskopik davranışları gerçekten de gösterirler. Örneğin, başlangıçta bir kutunun yarısında bulunan parçacıklar, tersinmez, ve homojen bir biçimde kutunun tamamını doldurur. (Bunun, hesaplama hassasiyetinin sınırları ile ilgisi yoktur; aynı makroskopik tersinmezlik, hücrel otomasyon gibi tam olarak tersinir tam sayı temelli benzetimlerde de gözlenir.) Dolayısıyla, gözlenen tersinmezliklerin kaynağı büyük parçacık topluluklarının klasik evriminde aranmalıdır.

Boltzmann denklemi, denklem (III.49)'da gösterildiği gibi, açıkça zamanda tersinir olmayan, karşılaştığımız ilk denklemdir. Dolayısıyla, bu sonucu Hamilton hareket denklemlerinden nasıl elde ettiğimiz sorusunu sorabiliriz. Sorunun yanıtı, elbette, denklem (III.41)'i elde etmekte kullandığımız fiziksel temeli olan yaklaşıklıklarda aranmalıdır. Uygulanan yaklaşıklıkların ilk adımları, denklem (III.30)'un sağ tarafındaki üç parçacık çarpışması terimlerinin ihmal edilmesi, ve

[†] Zamana bağlı Schrödinger denklemi tamamen zamanda tersinirdir. Eğer gözleyen aygıtın (muhtemelen tüm evrenin) dalga fonksiyonunu da içeren karmaşık bir dalga fonksiyonu yazmak mümkün olsa, herhangi bir tersinmezliğin nasıl ortaya çıkabileceğini görmek zor olurdu.

uzay ve zaman ölçeklerinde çözünürlüğün içsel olarak kabalaştırılmasıdır. Bu adımlardan hiçbiri zamanda tersinirlik simetrisini açıkça ihlal etmez, ve denklem (III.37)'deki çarpışma terimi özelliğini korur. Denklem (III.41)'e giderken sonraki adım, *çarpışmadan önce değerlendirilen* iki parçacık yoğunluğu $f_2(-)$ 'yi, denklem (III.32)'deki gibi iki tek parçacık yoğunluğunun çarpımıyla yer değiştirmektir. Bu durumda, çarpışmadan önceki ve sonraki iki parçacık yoğunluklarını farklı ele alır. Alternatif olarak, denklem (III.37)'yi, *çarpışmadan sonra değerlendirilen* iki parçacık yoğunluğu $f_2(+)$ ile ifade edebiliriz. $f_2(+)$ 'yi, iki tek parçacık yoğunluğunun çarpımıyla yer değiştirmek, bizi tam ters bir sonuca götürürdü!: $dH/dt \geq 0$. Dengedeki bir sistem için, iki seçenektan birini diğerine tercih etmek için bir sebep yoktur. Ancak, sistem denge dışı olduğunda, çarpışmadan sonraki koordinatların ilişkili olması çok daha olası olduğundan, denklem (III.32)'deki $f_2(+)$ için yerine koyma anlamlı değildir. Zamanda tersinme simetrisi, $f_2(-)$ 'de de, *moleküler kaos varsayımı* denilen yaklaşımda ihmal edilen, bazı ince ilişkilerin olmasını gerektirir.

Çarpışmalardan önceki (ama sonraki değil) moleküler kaos varsayımı, Boltzmann denkleminin tersinmezliği için anahtar konumundayken, sonucundaki bilgi kaybı, en iyi uzay ve zamandaki kabalaştırma yoluyla anlaşılabilir. Liouville denklemi ve ondan türetilenler, bir saf durumun evrimi hakkında kesin bilgi içerir. Ancak, bu bilgi kaçınılmaz olarak daha kısa ölçeklere taşınır. Bunun iyi bir tasviri, karışmayan iki sıvının harmanlanmasıdır. Her noktada iki sıvı birbirinden ayrık kalsa da, uzayda bir sıvıdan diğerine geçiş, karıştırdıkça gittikçe daha küçük ölçekte gerçekleşir. Bir noktada, herhangi bir ölçüm aletinin, iki bileşen sıvının izini takip edemeyeceği kadar ince bir çözünürlüğe erişilir. Boltzmann denkleminde, saf durumun kesin bilgisi, çarpışmaların ölçeğinde kaybolur. Sonuçtaki tek parçacık yoğunluğu, sadece iki parçacık çarpışmasınıninkinden daha uzun uzay ve zaman çözünürlüklerini tanımlar, ve bilgi kaybı sürdükçe, gittikçe daha olasılıklı hale gelir.

III.F Denge Özellikleri

Homojen bir gazın f_1 , ile tanımlanan denge durumunun doğası nedir?

(1) *Denge dağılımı*: Gaz dengeye ulaştıktan sonra, H fonksiyonu artık zaman içinde azalmamalıdır. Denklem (III.48)'deki integrand her zaman pozitif olduğundan, $dH/dt=0$ için bir *gerek* koşul şudur,

$$f_1(\vec{p}_1, \vec{q}_1) f_1(\vec{p}_2, \vec{q}_1) - f_1(\vec{p}_1', \vec{q}_1) f_1(\vec{p}_2', \vec{q}_1) = 0, \quad (\text{III.50})$$

yani, her \vec{q} noktasında şu sağlanmalıdır:

$$\ln f_1(\vec{p}_1, \vec{q}) + \ln f_1(\vec{p}_2, \vec{q}) = \ln f_1(\vec{p}_1', \vec{q}) + \ln f_1(\vec{p}_2', \vec{q}). \quad (\text{III.51})$$

Yukarıdaki denklemin sol tarafı, bir iki parçacık çarpışmasından önceki momentumları, sağ tarafı ise sonrakileri içerir. Eşitlik, dolayısıyla, çarpışma sırasında korunan her toplanır özellik tarafında sağlanır. Bir esnek çarpışmada, bu şekilde korunan 5 nicelik vardır: parçacık sayısı, net momentumun üç bileşeni, ve kinetik enerji. Böylece, f_1 için bir genel çözüm şöyledir:

$$\ln f_1 = a(\vec{q}) - \vec{\alpha}(\vec{q}) \cdot \vec{p} - \beta(\vec{q}) \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right). \quad (\text{III.52})$$

Potansiyel enerji $U(\vec{q})$ 'yu kolaylıkla yukarıdaki biçime uydurup, şöyle yazabiliriz:

$$f_1(\vec{p}, \vec{q}) = \mathcal{N}(\vec{q}) \exp \left[-\vec{\alpha}(\vec{q}) \cdot \vec{p} - \beta(\vec{q}) \left(\frac{p^2}{2m} + U(\vec{q}) \right) \right]. \quad (\text{III.53})$$

Yukarıdaki dağılımın, *yerel dengeyi* tanımladığını söyleyeceğiz. Bu biçim, *çarpışmalar sırasında* korunurken, eğer $\{\mathcal{H}_1, f_1\} = 0$ değilse, *çarpışmalar arasında*, akan terimler sayesinde zaman içinde evrilir. Bu son koşul, sadece \mathcal{H}_1 , veya onunla korunan herhangi bir nicelikle bağımlılığı olan her f_l fonksiyonunca sağlanır. Açıkça, yukarıdaki yoğunluk, \mathcal{N} ve β , \vec{q} 'dan bağımsız, ve $\vec{\alpha}=0$ ise bu koşulu sağlar.

Denklem (III.16)'ya göre, f_1 için uygun normalleştirme:

$$\int d^3\vec{p} d^3\vec{q} f_1(\vec{p}, \vec{q}) = N. \quad (\text{III.54})$$

V hacimli bir kutudaki parçacıklar için, $U(\vec{q})$ potansiyeli kutunun içinde sıfır, dışında sonsuzdur. Denklem (III.53)'teki normalleştirme çarpanı, denklem (III.54)'den elde edilebilir:

$$N = \mathcal{N}V \left[\int_{-\infty}^{\infty} dp_i \exp \left(-\alpha_i p_i - \frac{\beta p_i^2}{2m} \right) \right]^3 = \mathcal{N}V \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{m\alpha^2}{2\beta} \right). \quad (\text{III.55})$$

Böylece, momentumların uygun şekilde normalleştirilmiş Gauss tipi dağılımı şöyledir,

$$f_1(\vec{p}, \vec{q}) = n \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{\beta(\vec{p} - \vec{p}_0)^2}{2m} \right], \quad (\text{III.56})$$

burada, $\vec{p}_0 = \langle \vec{p} \rangle = m\vec{\alpha}/\beta$ gazın ortalama momentum değeri olup, duran bir kutu için sıfırdır, ve $n = N/V$ parçacık yoğunluğudur. Dağılımın Gauss tipli olduğundan, momentumun her bileşeninin varyansının $\langle p_i^2 \rangle = m/\beta$ olduğu çıkarımı kolaylıkla yapılabilir, ve

$$\langle p^2 \rangle = \langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rangle = \frac{3m}{\beta} \quad . \quad (\text{III.57})$$

(2) İki gaz arasında denge: İki farklı (a) ve (b) gazlarını alalım, aynı U potansiyelinde hareket etsinler ve aralarındaki iki parçacık etkileşimi $\mathcal{V}_{ab}(\vec{q}^{(a)} - \vec{q}^{(b)})$ olsun. İki gazın tek parçacık yoğunluklarını $f_1^{(a)}$ ve $f_1^{(b)}$ olarak tanımlayabiliriz. Bir genelleştirilmiş çarpışma integrali,

$$C_{\alpha,\beta} = - \int d^3\vec{p}_2 d^2\Omega \left| \frac{d\sigma_{\alpha,\beta}}{d\Omega} \right| |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \left[f_1^{(\alpha)}(\vec{p}_1, \vec{q}_1) f_1^{(\beta)}(\vec{p}_2, \vec{q}_1) - f_1^{(\alpha)}(\vec{p}_1', \vec{q}_1) f_1^{(\beta)}(\vec{p}_2', \vec{q}_1) \right], \quad (\text{III.58})$$

kullanılarak, bu yoğunlukların evrimi Boltzmann denkleminin basit bir genelleştirmesiyle yönetilir:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_1^{(a)}}{\partial t} = - \left\{ f_1^{(a)}, \mathcal{H}_1^{(a)} \right\} + C_{a,a} + C_{a,b} \\ \frac{\partial f_1^{(b)}}{\partial t} = - \left\{ f_1^{(b)}, \mathcal{H}_1^{(b)} \right\} + C_{b,a} + C_{b,b} \end{cases} \quad . \quad (\text{III.59})$$

Durağan dağılımlar, denklem (III.59)'un sağ tarafındaki altı terimin tümü sıfırsa elde edilir. Türler arası çarpışmaların yokluğunda, yani $C_{a,b} = C_{b,a}$ iken, bağımsız durağan çözümler, $f_1^{(a)} \propto \exp(-\beta_a \mathcal{H}_1^{(a)})$ ve $f_1^{(b)} \propto \exp(-\beta_b \mathcal{H}_1^{(b)})$, elde edilir. $C_{a,b}$ 'nin sıfıra gitmesini istersek, şu ek kısıtı buluruz:

$$\begin{aligned} f_1^{(a)}(\vec{p}_1) f_1^{(b)}(\vec{p}_2) - f_1^{(a)}(\vec{p}_1') f_1^{(b)}(\vec{p}_2') = 0, \implies \\ \beta_a \mathcal{H}_1^{(a)}(\vec{p}_1) + \beta_b \mathcal{H}_1^{(b)}(\vec{p}_2) = \beta_a \mathcal{H}_1^{(a)}(\vec{p}_1') + \beta_b \mathcal{H}_1^{(b)}(\vec{p}_2') \quad . \end{aligned} \quad (\text{III.60})$$

Toplam enerji $\mathcal{H}_1^{(a)} + \mathcal{H}_1^{(b)}$ bir çarpışmada korunduğundan, yukarıdaki denklem $\beta_a = \beta_b = \beta$ için sağlanabilir. Denklem (III.57)'den, bu koşul iki türün kinetik enerjilerinin eşit olmasını gerektirir.

$$\left\langle \frac{p_a^2}{2m_a} \right\rangle = \left\langle \frac{p_b^2}{2m_b} \right\rangle = \frac{3}{2\beta} \quad . \quad (\text{III.61})$$

Dolayısıyla, β parametresi, gazların dengesini tanımlayan, deneysel sıcaklık rolünü

oyun.

(3) Durum denklemi: β 'nin sıcaklık T olarak tanımlanmasını tamamlamak için, V hacimli bir kutuya konmuş N parçacıklı bir gaz düşünelim. Gazın basıncı, kutunun duvarlarıyla çarpışan parçacıkların uyguladıkları kuvvetten gelir. x yönüne dik, alanı A olan bir duvar elemanı ele alalım. Bu alana, $[\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p}]$ aralığında momentumlarla, δt süresi boyunca çarpan parçacıkların sayısı şudur:

$$d\mathcal{N}(\vec{p}) = (f_1(\vec{p})d^3\vec{p})(A v_x \delta t) \quad . \quad (\text{III.62})$$

Yukarıdaki ifadedeki son çarpan, yüksekliği $v_x\delta t$ ve alan elemanı A 'ya dik olan bir silindirin hacmidir. Sadece bu silindirin içindeki parçacıklar, δt içinde duvara çarpacak kadar yakındır. Her bir çarpışma duvara momentumu aktardığından, uygulanan net kuvvet şudur:

$$F = \frac{1}{\delta t} \int_{-\infty}^0 dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z f_1(\vec{p}) \left(A \frac{p_x}{m} \delta t \right) (2p_x). \quad (\text{III.63})$$

Sadece hızları duvara doğru yönlenmiş parçacıklar ona çarpacağından, birinci integral, p_x 'in değerlerinin yarısı üzerindedir. İntegrand p_x 'e göre çift olduğundan, bu kısıtlama kaldırılıp tüm integral 2'ye bölünebilir. Basınç P , birim alana düşen kuvvetten şöyle elde edilir:

$$P = \frac{F}{A} = \int d^3\vec{p} f_1(\vec{p}) \frac{p_x^2}{m} = \frac{1}{m} \int d^3\vec{p} p_x^2 n \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\beta p^2}{2m}\right) = \frac{n}{\beta} \quad , \quad (\text{III.64})$$

burada, denklem (III.56), f_1 'in denge biçimi için kullanılır. İdeal bir gazın standart durum denklemi $PV = Nk_B T$ ile karşılaştırıldığında $\beta = 1/k_B T$ tanımlaması bulunur.

(4) Entropi: Daha önce tartışıldığı üzere, Boltzmann H-fonksiyonu, tek parçacık OYF ρ_1 'in bilgi içeriğiyle ilişkilidir. Buna karşılık gelen bir Boltzmann entropisi de tanımlayabiliriz.

$$S_B(t) = -k_B H(t), \quad (\text{III.65})$$

burada, k_B sabiti, entropinin tarihsel kökenini yansıtır. H-teoremi, dengeye yaklaşırken, S_B 'nin zamana göre sadece yükselebileceğini gerektirir. Açıkça denge dışı durumlarda denklem (III.42) ile tanımlanma avantajına da sahiptir. V hacimli bir kutunun içinde dengede olan bir gaz için, denklem (III.56)'dan şunu hesaplarız.

$$\begin{aligned}
H &= V \int d^3\vec{p} f_1(\vec{p}) \ln f_1(\vec{p}) \\
&= V \int d^3\vec{p} \frac{N}{V} (2\pi m k_B T)^{-3/2} \exp\left(-\frac{p^2}{2m k_B T}\right) \left[\ln\left(\frac{n}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}\right) - \frac{p^2}{2m k_B T} \right] \\
&= N \left[\ln\left(\frac{n}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}\right) - \frac{3}{2} \right].
\end{aligned} \tag{III.66}$$

Şimdi entropi şöyle tanımlanır,

$$S_B = -k_B H = N k_B \left[\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \ln(2\pi m k_B T) - \ln\left(\frac{N}{V}\right) \right]. \tag{III.67}$$

Termodinamik bağıntısı $TdS_B = dE + PdV$ şunu gerektirir:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V &= T \left. \frac{\partial S_B}{\partial T} \right|_V = \frac{3}{2} N k_B, \\
P + \left. \frac{\partial E}{\partial V} \right|_T &= T \left. \frac{\partial S_B}{\partial V} \right|_T = \frac{N k_B T}{V}.
\end{aligned} \tag{III.68}$$

Tek atomlu ideal gazın alışılmış özellikleri, $PV = N k_B T$, ve $E = 3N k_B T/2$, yukarıdaki denklemlerden elde edilebilir. Ayrıca, bu klasik gaz için (III.67)'deki entropinin sıfır derece limiti, termodinamiğin üçüncü yasasını ihlal ederek, yoğunluk n 'den bağımsız *değildir*.