

- Дәріс жоспары:** 1) Гармониялық осциллятор үшін Гамильтон функциясы.
 2) Жазық ротатордың энергиясы.
 3) Кеңістіктік ротатордың энергиясы.
 4) Кванттық микроканондық таралу.

Жүйені кванттық-механикалық сипаттағанда күйдің классикалық ұғымын қолдануға болмайды. Кванттық механикада күй толқындық функциямен сипатталады. Кванттық механикада бөлшектің қозғалыс траекториясы ұғымы жоқ. **Анықталмағандық қатынасы** бойынша

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Кванттық-механикалық күйдегі қозғалыста бөлшек бір уақытта анықталған координат және импульс мәндері бола алмайды. Жалпы айтқанда кванттық-механикалық күйлерде жүйенің белгілі физикалық шамалары бола алады немесе бола алмайды.

Белгілі энергиясы бар күйді **стационар күй** деп атайды. Жүйенің энергиясы дискретті немесе үздіксіз шамалардың жиынтығын қабылдай алады.

Энергияны мәндерін қабылдайтын шамаларды энергия деңгейі деп атайды. Егер берілген энергияның микрокүйлердің саны бірден көп болса, онда жүйенің энергия деңгейі азғындалған, ал берілген энергияның бос микрокүйлердің санын **азғындау еселік** деңгейін дейді. Берілген энергиямен микрокүйдің бір-бірінен ерекшелігі, яғни басқа физикалық шамалар әр түрлі мәндерді қабылдайды. Жүйені кванттық қарастыру кезінде, қозғалыс интегралы болатын, физикалық шамалардың жиынтығын белгілеуге болады. Олар энергия сияқты стационар күйде белгілі мәндерге ие болады.

Бөлшектің массасы **m**, серпімді күштің әсерінен қозғалатын сызықты **бірөлшемді гармониялық осцилляторды** мысалға келтірейік. Гармониялық осциллятор үшін Гамильтон функциясы

$$E = H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2. \quad (46)$$

Классикалық түрден келтіргенде энергия кез-келген оң болады $E \geq 0$. Ал фиксациялық энергия болғанда осциллятордың қозғалысы көптеген классикалық микрокүйлерден өтеді, **q(t)** координата және **p(t)** импульс мәндерімен берілетін болса. Кванттық жағдайда **осциллятордың энергиясы** тек дискретті мәндерді қабылдай алады

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (47)$$

Әрбір энергия деңгейіне тек бір микрокүй ғана сәйкес, яғни осциллятордың энергия деңгейі азғындалмаған болады. Басқа мысал: **жазық ротатор** – радиусы **r** шеңбер бойынша қозғалатын, М массасы бар материалдық нүкте (оның инерция моменті **I=mr²**). Бұл еркіндік дәрежесі бір, жүйе. Жалпыланған координата ретінде **φ** бұрышын алайық, **φ** бұрышы шеңбердегі материалдық нүктенің орнын анықтайды. Жазық ротатордың энергиясы үшін классикалық формуласы (**Гамильтон функциясы**)

$$E = H = \frac{p_\phi^2}{2I} = \frac{p_\phi^2}{2I}, \quad p_\phi = I\dot{\phi}. \quad (48)$$

Мұндағы **p_φ** жалпыланған импульс, **φ** координатасында түйіндескен және айналу центріне қатысты импульс моментін білдіреді. Ротатордың классикалық энергиясы кез-келген теріс емес мәнді қабылдай алады. Жазық ротатордың кванттық микрокүйін **m** кванттық санмен номерлеуге болады. **m=0, ±1, ±2, ...** мәндерін қабылдай алады, ал бұл микрокүйлердің

энергиясы мынаған тең

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (49)$$

яғни кванттық жазық ротатор энергиясының барлық деңгейлері **екі есе азғындалған** бас, ең төменгіні қоспағанда ($m=0$).

Тағы бір мысал: **кеңістіктік ротатор** – радиусы r сфера жазықтығы бойынша қозғалатын, m массасы бар материалдық нүкте (айналу центріне қатысты оның инерция моменті $I=mr^2$). Бұл жүйенің екі еркіндік дәрежесі бар: сферадағы нүктенің орнын екі сфералық бұрыштарымен θ және φ анықталады. Кеңістіктік ротатордың энергиясы үшін классикалық формуласы (**Гамильтон функциясы**)

$$E = H = \frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\varphi^2}{2I \sin^2 \theta}, \quad p_\theta = I\dot{\theta}, \quad p_\varphi = I \sin^2 \theta \dot{\varphi}.$$

Классикалық механикада кеңістіктік ротатордың кез-келген теріс емес энергиясы бола алады. Кванттық механикада кеңістіктік ротатор **дискретті деңгей жиынтығын** қабылдай алады.

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Әр деңгей $2l+1$ есе азғындалған. Берілген энергиясы бар күйлер белгіленген бағытқа қозғалыс санның моментінің проекциямен ажыратылады. Олар да дискретті мәндер жиынын қабылдайды

$$M_z = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Бірақ қозғалыстың шекаралық шарты бар. Бұл жерде кванттық-механикалық және классикалық сипаттау мүмкін. Бұл жағдайда фазалық кеңістік көлемі арасындағы сәйкестігін орнатуға болады. Яғни классикалық қозғалыс және кванттық-механикалық микрокүйлердің саны арасындағы сәйкестік болады. Бір кванттық микрокүй үшін h^{3N} тең фазалық кеңістіктік көлемі сәйкес болады екен. Егер фазалық кеңістіктік бойынша интегралдау кванттық күйлер бойынша қосыныдысына сәйкес. Кванттық механикада бірдей бөлшектер жүйесінде бөлшектерді ауыстыру жаңа микрокүйдің пайда болуын білдірмейді. Сондықтан $N!$ фазалық кеңістікте h^{3N} көлемшелері, фазалық кеңістік ауысулармен шашыраған, бір микрокүйге сәйкес, яғни фазалық кеңістікте бір микрокүйге $h^{3N}N!$ көлемге сәйкес, ал берілген $dqdp$ көлеміне фазалық кеңістікте $d\Gamma = \frac{dqdp}{h^{3N}N!}$

микрокүйлер сәйкес болады. Сондықтан классикалық статистикалық физикада фазалық кеңістік бойынша интегралдауы, $\frac{1}{h^{3N}N!}$ көбейткішті есептегенде, микрокүйлерді қосқанға

тең болады.

Кванттық сипаттамада микроқозғалысты кванттық түсінуде микрокүй ұғымымен басынан қолданылады. Шекті көлемін алатын жүйелерде микрокүйлер дискретті. Кванттық статистикада микрокүйдің таралу функциясын енгізеді. Оны $\rho(E_\alpha)$ деп белгілейік, мұндағы $\alpha \equiv (i, n)$ – микрокүйдің индексі. Таралу функциясы үшін **нормалау шарты**

$$\sum_{\alpha} \rho(E_\alpha) = \sum_{i,n} \rho(E_i) = \sum_i g_i \rho(E_i) = 1,$$

Мұндағы $g_i - E_i$ энергия деңгейінің азғындалу дәрежесі.

Егер энергия деңгейлері бір-біріне өте жақын орналасса, онда энергияны үздіксіз таралады деп қарастыруға болады. Онда нормировка шарты солай жазылады

$$\int \rho(E) g(E) dE = 1,$$

Мұндағы $g(E)dE - dE$ энергия интервалына келетін микрокүйлер саны.

Енді классикалық таралуда қарастырған кванттық аналогтарының фнықтамаларына өтейік. Кванттық статистикада ансамбльдер классикалықтағыдай бірдей анықталады. Бірақ ансамбль жүйелері кванттық микрокүйлерімен таралады, яғни микробөлшек қозғалысын сипаттау үшін кванттық механиканың заңдары қолданылады.

Кванттық микрoканондық таралу

Ансамбль жүйелерінің энергиясы фиксацияланған, ал барлық микрокүйлер белгілі энергиямен **бірықтималды**

$$\rho_{qmc}(\alpha, E, V, N) = \frac{1}{g(E, V, N)} \delta_{E, E_\alpha} \rho_{qmc}(\alpha, E, V, N) = \frac{1}{g(E, V, N)} \delta(E - E_\alpha)$$

Жүйенің дискретті және тұтас спектр жағдайындағы энергияларына сәйкес. Макроскопиялық жүйелер үшін энергия спектрін тұтас деп есептеуге болады. Микрокүйлер саны мынаған тең $\Delta W = g(E, V, N) \Delta E$, және энтропияның статистикалық анықтамасы бойынша (12)

$$S(E, V, N) = k \ln g(E, V, N) \Delta E.$$

Бақылау сұрақтары:

- 1) Гармониялық осциллятор үшін Гамильтон функциясын жазыңыз.
- 2) Жазық ротатордың энергиясын көрсетіңіз.
- 3) Кеңістіктік ротатордың энергиясын көрсетіңіз.

Пайдаланған әдебиеттер: негізгі әдебиет – [1-7], қосымша әдебиет [1-3].