

Белгілеулер және тұрақтылар

N — бөлшектер саны; v — зат мөлшері;

$n = N/V$ — сандық концентрация;

p — қысым, ал фазалық есептердегі p — импульс;

$\beta = 1/(k_B T)$. C_V — бүкіл жүйенің,

$C_{V,m}$ — бір мольдің жылу сыйымдылығы.

Барлық логарифмдер — натурал логарифмдер.

$k_B = 1.380649 \times 10^{-23}$ J/K;

$N_A = 6.02214076 \times 10^{23}$ mol⁻¹;

$R = N_A k_B = 8.314462618$ J/(mol K).

$h = 6.62607015 \times 10^{-34}$ J s;

$\hbar = h/(2\pi)$;

$c = 2.99792458 \times 10^8$ m/s;

1 eV = $1.602176634 \times 10^{-19}$ J.

Орташа энергия және статистикалық тәуелсіздік

Физикалық шамалардың орташа мәндері. Статистикалық ансамбль. Жүйелердің статистикалық тәуелсіздігі.

Шарты. Термостатпен тепе-теңдіктегі екі өзара әсерлеспейтін, орындары бекітілген екідеңгейлі орталық бар. Әр орталықтың энергиясы 0 немесе $\Delta > 0$ болады. Әрқайсысының қозған күйде болу ықтималдығы $1/4$. Канондық ансамбльде орталықтар тәуелсіз деп алынады. Толық энергияның таралуын, орташа энергияны, $\langle E_1 E_2 \rangle$ және ковариацияны табыңыз.

1. Бір орталықтың таралуын жазу. Негізгі күй ықтималдығы $3/4$, қозған күйдікі $1/4$. Канондық таралумен байланысы:

$$\frac{P(E_i = \Delta)}{P(E_i = 0)} = e^{-\beta\Delta} = \frac{1}{3}, \quad \beta\Delta = \ln 3.$$

2. Бірлескен ықтималдықтарды құру. Тәуелсіздік $P(E_1, E_2) = P(E_1)P(E_2)$ түрінде қолданылады.

E_1	E_2	Толық энергия E	Бірлескен ықтималдық
0	0	0	9/16
0	Δ	Δ	3/16
Δ	0	Δ	3/16
Δ	Δ	2Δ	1/16

Энергиясы Δ болатын екі түрлі микрокүйдің ықтималдықтарын қосамыз:

$$P(E = 0) = \frac{9}{16}, \quad P(E = \Delta) = \frac{6}{16}, \quad P(E = 2\Delta) = \frac{1}{16}.$$

3. Орташа мәндерді есептеу.

$$\langle E_i \rangle = 0 \cdot \frac{3}{4} + \Delta \cdot \frac{1}{4} = \frac{\Delta}{4}; \quad \langle E \rangle = \frac{6\Delta}{16} + \frac{2\Delta}{16} = \frac{\Delta}{2}.$$

$E_1 E_2$ көбейтіндісі тек екі орталық та қозған кезде нөлден өзгеше:

$$\langle E_1 E_2 \rangle = \frac{\Delta^2}{16}.$$

4. Ковариацияны табу.

$$\text{Cov}(E_1, E_2) = \langle E_1 E_2 \rangle - \langle E_1 \rangle \langle E_2 \rangle = \frac{\Delta^2}{16} - \frac{\Delta^2}{16} = 0.$$

Жауабы. Толық энергияның ықтималдықтары: $9/16$, $6/16$, $1/16$; $\langle E \rangle = \Delta/2$; $\langle E_1 E_2 \rangle = \Delta^2/16$; ковариация нөлге тең.

Түсіндіру. Канондық ансамбльде температура бекітіледі, энергия өзгеруі мүмкін. Өзара әсерлеспеу мен канондық шарттар мұнда таралудың көбейтіндіге жіктелуін береді. Толық энергияны дәл бекітсек, орталықтар арасында статистикалық тәуелділік пайда болуы мүмкін. Жалпы жағдайда ковариацияның нөл болуының өзі тәуелсіздікті дәлелдемейді.