

Белгілеулер және тұрақтылар

N — бөлшектер саны; ν — 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 жылусыйымдылығы.

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.

Лиувилль теоремасы және стационар таралу

Лиувилль теоремасы. Тұйық жүйе қозғалысының интегралдары және таралу функциясы.

Шарты. Оқшауланған бірөлшемді осциллятор үшін $m = 1.00 \text{ kg}$, $\omega = 2.00 \text{ s}^{-1}$. Ансамбльдің бастапқы тығыздығы $\rho_0(q, p) = C e^{-\alpha H(q, p)}$, мұнда $\alpha = 0.500 \text{ J}^{-1}$. Фазалық ағынның аудан сақтайтынын дәлелдеңіз, C тұрақтысын табыңыз және таралудың уақытқа тәуелсіз екенін көрсетіңіз. $q_0 = 1.00 \text{ m}$, $p_0 = 0$ нүктесінің $t = \pi/4 \text{ s}$ мезетіндегі координаталарын есептеңіз.

1. Қозғалыс теңдеулерін шешу.

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q.$$

Бастапқы нүкте арқылы шешім:

$$q = q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, \quad p = p_0 \cos \omega t - m\omega q_0 \sin \omega t.$$

2. Фазалық көлемнің сақталуын тексеру. Түрлендірудің Якобианы:

$$J = \det \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t / (m\omega) \\ -m\omega \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} = \cos^2 \omega t + \sin^2 \omega t = 1.$$

Демек, $dq dp = dq_0 dp_0$. Сонымен бірге фазалық ағын дивергенциясы $\partial \dot{q} / \partial q + \partial \dot{p} / \partial p = 0$. Бұл — Лиувилль теоремасының осы жүйедегі көрінісі.

3. Таралуды нормалау. Екі Гаусс интегралын есептейміз:

$$\int e^{-\alpha H} dq dp = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha m \omega^2}} \sqrt{\frac{2\pi m}{\alpha}} = \frac{2\pi}{\alpha \omega}.$$

Сондықтан $C = \alpha \omega / (2\pi) = 1 / (2\pi \text{ J s})$.

4. Стационарлықты көрсету. H уақытқа айқын тәуелді емес және қозғалыс интегралы: $dH/dt = 0$. Лиувилль теңдеуі $\partial_t \rho + \{\rho, H\} = 0$. Егер $\rho = f(H)$ болса, $\{f(H), H\} = 0$; берілген таралу үшін $\partial_t \rho = 0$. Әр траектория бойында тығыздық та тұрақты.

5. Нүктенің орнын табу. $\omega t = \pi/2$ кезінде $q = 0$, $p = -2.00 \text{ kg m/s}$. Бастапқы және соңғы энергиялар $H = 2.00 \text{ J}$; екі нүктеде де $\rho = C/e$.

Жауабы. $J = 1$; $C = 1 / (2\pi \text{ J s})$; $\rho(q, p, t) = C e^{-\alpha H(q, p)}$; соңғы нүкте $(0, -2.00 \text{ kg m/s})$.

Түсіндіру. Лиувилль теоремасы ықтималдық тығыздығының траектория бойымен сақталуын айтады. Ол кез келген бастапқы таралу міндетті түрде тепе-теңдікке келеді деген тұжырым емес. Мұндағы α — берілген ансамбльдің параметрі.