

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.

Үш статистикалық ансамбльді салыстыру

Микроканондық, канондық және үлкен канондық таралулар.

Шарты. Шағын ұяшықта ең көбі бір бөлшек бола алады. Ұяшықтың төрт микрокүйі бар: бос күй ($N = 0, E = 0$); бір бөлшекті екі негізгі күй a, b ($N = 1, E = 0$); бір қозған күй c ($N = 1, E = \Delta$). Осы модельді үш жағдайда зерттеңіз: микроканондық ансамбльде $N = 1, E = 0$; канондық ансамбльде $N = 1$ және $\beta\Delta = \ln 2$; үлкен канондық ансамбльде сол температурада $\mu = 0$. Ықтималдықтар мен орташа энергияларды табыңыз; соңғы жағдайда $\langle N \rangle$ да есептелсін.

Модель. Ең көбі бір бөлшек шарты — ұяшық моделінің жеке шектеуі. Сондықтан екі және одан көп бөлшекті күйлер статистикалық қосындыға кірмейді.

1. Микроканондық ансамбль. $N = 1, E = 0$ талаптарына тек a, b сәйкес келеді. Қолжетімді күйлер саны $W = 2$, сондықтан

$$P_a = P_b = \frac{1}{2}, \quad P_c = P_{\text{vac}} = 0, \quad U = 0, \quad S = k_B \ln 2.$$

2. Канондық ансамбль. Бөлшек саны өзгермейді, энергия термостатпен алмасады. $x = e^{-\beta\Delta} = 1/2$ деп аламыз:

$$Z_1 = 1 + 1 + x = \frac{5}{2}, \quad P_a = P_b = \frac{1}{Z_1} = \frac{2}{5}, \quad P_c = \frac{x}{Z_1} = \frac{1}{5}.$$

Бос күй бұл ансамбльде жоқ. Орташа энергия $U = \Delta P_c = \Delta/5$.

3. Үлкен канондық ансамбль. Ұяшық энергиямен де, бөлшекпен де алмасады. $z = e^{\beta\mu} = 1$ болғанда

$$E = 1 + zZ_1 = \frac{7}{2}.$$

Бірінші қосылғыш — бос күйдің үлесі. Нормаланған таралу:

$$P_{\text{vac}} = P_a = P_b = \frac{2}{7}, \quad P_c = \frac{1}{7}.$$

Орташа мәндер:

$$\langle N \rangle = \frac{2}{7} + \frac{2}{7} + \frac{1}{7} = \frac{5}{7}, \quad U = \frac{\Delta}{7}.$$

4. Нәтижелердің байланысын тексеру. Үлкен канондық ансамбльде ұяшықтың толы екені белгілі болса,

$$P(c | N = 1) = \frac{P_c}{P(N = 1)} = \frac{1/7}{5/7} = \frac{1}{5}.$$

Бұл канондық ықтималдықпен бірдей. Сонымен бірге $\text{Var}(N) = \langle N \rangle(1 - \langle N \rangle) = 10/49$.

Жауабы. Микроканондық жағдайда $U = 0$; канондық жағдайда $U = \Delta/5$; үлкен канондық жағдайда $U = \Delta/7$, $\langle N \rangle = 5/7$.

Түсіндіру. Ансамбльдер арасындағы айырмашылық — жүйеге қойылған шектеулер мен ортамен алмасуға рұқсат берілген шамалар. Энергия деңгейінің еселігін, яғни $E = 0, N = 1$ үшін екі бөлек микрокүй бар екенін, статистикалық қосындыда сақтау қажет.