

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.

Кванттық микроканондық ансамбль

Кванттық статистикалық физика элементтері. Кванттық микроканондық таралу.

Шарты. Үш бекітілген орында орналасқан, өзара әсерлеспейтін екідеңгейлі орталықтың әрқайсысында 0 және Δ энергиялары бар. Толық энергия дәл $E = \Delta$ деп берілген. Микроканондық күйлерді, тығыздық операторын, энтропияны және толық энергия дисперсиясын табыңыз. Бірінші орталықтың қозу ықтималдығын және бірінші мен екінші орталықтардың қозу сандарының ковариациясын есептеңіз.

Модель. Орталықтар орналасу орындарымен ажыратылады. $|n_1 n_2 n_3\rangle$ белгілеуінде $n_i = 0$ немесе 1. Энергетикалық терезе басқа толық энергия деңгейлерін қамтымайтындай тар деп алынады.

1. Қолжетімді кванттық күйлерді санау. $E = \Delta$ шарты $n_1 + n_2 + n_3 = 1$ дегенді білдіреді. Рұқсат етілген үш күй:

$$|100\rangle, \quad |010\rangle, \quad |001\rangle; \quad W = 3.$$

2. Тығыздық операторын жазу. Микроканондық ансамбльде осы ортогонал күйлер тең ықтималды:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3}(|100\rangle\langle 100| + |010\rangle\langle 010| + |001\rangle\langle 001|).$$

Оның нөлден өзге меншікті мәндері $1/3, 1/3, 1/3$, ал $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$.

3. Энтропия және энергия флуктуациясы.

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = k_B \ln 3.$$

Барлық қолжетімді күйлердің энергиясы Δ , сондықтан

$$\langle H \rangle = \Delta, \quad \langle H^2 \rangle = \Delta^2, \quad \text{Var}(H) = 0.$$

4. Ішкі жүйелер арасындағы байланысты табу. Бірінші орталық үш күйдің біреуінде ғана қозған:

$$\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle = \frac{1}{3}.$$

Екі орталықтың бір мезгілде қозуы толық энергия шартына қайшы, сондықтан $\langle n_1 n_2 \rangle = 0$ және

$$\text{Cov}(n_1, n_2) = 0 - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3} = -\frac{1}{9}.$$

Жауабы. $W = 3$; әр күйдің ықтималдығы $1/3$; $S = k_B \ln 3$; энергия дисперсиясы нөл; $P(n_1 = 1) = 1/3$; ковариация $-1/9$.

Түсіндіру. Орталықтар өзара әсерлеспесе де, толық энергияның бекітілуі оларды статистикалық тәуелді етеді. Теріс ковариация бір орталық қозса, екіншісінің қозуына энергия жетпейтінін көрсетеді. Микроканондық аралас күйді осы үш күйдің когерентті таза суперпозициясымен теңестіруге болмайды: олардың тығыздық операторлары мен энтропиялары әртүрлі.