**№ 7-Дәріс**

**Тақырып**: Жүйе мен молекуланың күйінің статистикалық қосындысы.

**Мақсаты**: Жүйенің және молекуланың күйінің статистикалық қосындысын негіздеңіз.

Жүйе күйін оны құрайтын бөлшектердің күй функциясы ретінде қарастырғанда екі жағдайды ескеру керек. Бірінші жағдайда жүйенің қасиеттері ондағы бөлшектердің әрқайсысының сипаттамаларына тәуелді деп есептеледі және бөлшектер бір-біріне ұқсамайды, яғни олар бір-бірінен ажыратылған деп қарастырылады. Екінші жағдайда жүйенің қасиеттері сипаттамалары жағынан топтарға бөлінген (таралған) бөлшектердің санына тәуелді деп саналады. Бұл жағдайда бөлшектер бір-біріне ұқсас (бірдей) яғни ажыратылмаған бөлшектер деп есептеледі.

Егер жүйе бірдей бөлшектерден тұратын болса (екінші жағдай) және бөлшектердің энергиялық күйлері бірдей болса, онда мұндай жүйені *Максвелл-Больцман жүйесі* деп атайды.

Егер *N* бөлшектің күйлерін *i1, i2, …, iN* деп белгілесек, онда бөлшектер арасында әсерлесу күштері болмаған жағдайда жүйенің толық энергиясы былай жазылады:

**. (2.41)

Бұл кезде *i1, i2, …, iS, …, iN* индекстердің (белгілердің) әрбір мәні жүйенің әрбір күйіне сәйкес болады. Сонда жүйенің күй қосындысы мына түрде жазылады:

*Q = *, (2.42)

мұндағы қосындылау *i1, i2, …, iN* индекстердің барлық мәндері бойынша орындалады.

Барлық молекуланың энергиялық күйлері бірдей болғандықтан, - көбейткіштердің көбейтіндісі арқылы *F*-тің формуласын жеңілдетіп жазуға болады, сонда

*Q = *, (2.43)

мұндағы*εi* – бір молекуланың энергиялық күйлері; *Zмол* – молекулалық күй қосындысы.

Сөйтіп, күй қосындысын кейде *статистикалық қосынды* немесе *статистикалық интеграл* деп атайды – ол канондық ансамбльдің таралу функциясының нормалау көбейткіші.

(3)-теңдеудегі қосындыны есептеген кезде әрбір мүмкін болатын *i*-ші микрокүйлер жеке-жеке есептеледі. Бұл *i*-ші микрокүйлер жүйе бөлшектері бағынатын статистиканың түріне тәуелді. Бозе-Эйнштейн немес Ферми-Дирак статистикаларында мүмкін болатын күйлердің саны Больцман кванттық статистикасына қарағанда едәуір аз болады. Сондықтан *Zмол* шамасын есептегенде әр түрлі статистикада әр түрлі нәтижелер алынады.

Егер энергия деңгейлері туындалуға ұшыраған болса, онда қосындылау кезінде (3)-теңдеуде бірдей қосылғыштар пайда болады. Егер *Ei* – энергия деңгейі *gi*-еселі туындалған болса, онда бірдей *gi* қосылғыштар *exp * - түрінде алынады. Сонда (3)-теңдеу мына түрде жазылады:

*Z = *, (2.44)

мұнда қосындылау *i* микрокүйлер бойынша емес, *Ei* энергия деңгейлері бойынша жүргізіледі.

Кейде бірдей (ажыратылмаған) бөлшектерден тұратын жүйелер үшін күй қосындысын координаттар мен импульстер кеңістігі бойынша алынған интеграл арқылы да анықтайды (бұл интегралдың статистикалық интеграл деп аталуы осыдан). Егер жүйенің Гамильтон функциясы *H (p, q)* белгілі болса, онда күй қосындысы былай анықталады:

*Z (T, V, N) =*, (2.45)

мұндағы интеграл барлық *N* бөлшектердің координаттары мен импульстері бойынша алынады. Мұнда *h* = 6,63⋅10 -34 Дж⋅с – Планк тұрақтысы. Интеграл алдындағы көбейткіш арқылы бөлшектердің бірдейлігі (ажыратылмағандығы) және кванттық белгісіздік принципі ескеріледі; (5)-теңдеудегі интегралдың өлшемі: (координата⋅импульс)3N, ал статистикалық қосынды өлшемсіз шама.

Күй қосындысының басты қасиеті жүйе туралы барлық термодинамикалық мәліметтерді қамтуы болып табылады. Егер жүйенің күй қосындысы белгілі болса, онда сол арқылы барлық термодинамикалық функцияларын есептеуге және жүйенің күй теңдеуін табуға болады. Сөйтіп, статистикалық термодинамиканың негізгі міндеті жүйелердің күй қосындысын анықтау болып табылады.

Литература:

1.Оспанова А.К.,Омарова Р.А. Теоретические основы статистической термодинамики. Алматы. 2011.-с.103.

2.Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М. 1982.5 экз.