**№ 4 ДӘРІС**

**Тақырып:**Гиббстің микроканондық және канондық ансамблі. Максвелдің жылдамдығы бойынша үлестірілуі.

**Мақсаты:** Максвелл заңы көмегімен Гиббс ансамблінің физикалық мағынасын ашу.

Берілген макрокүйді микрокүйлер арқылы анықтау үшін, мүмкін болатын микрокуйлердің өте көп саны бойынша есептелінген орта шамалар қажет. Микрокүйлерді сипаттау үшін, кездейсоқ шамаларды сипаттаған сияқты, ықтималдық теория әдісі қолданылады.

Статистикалық термодинамикада, зерттелетін жүйенің сыртқы жағдайларына байланысты, орташа шамалардың екі типі есептелінеді:

а) жүйе энергиясы тұрақты (оқшауланған немесе жабық жүйелер) болған жағдайда *микроканондық орташалар* есептелінеді. Бұл кезде микрокүйлердің барлығы бір сипатта және тең ықтималды деп қарастырылады;

ә) жүйе температурасы тұрақты (мысалы, жүйе термостатта орналасқан) болса онда канондық орташалар есептелінеді. Бұл кезде жүйе термодинамикалық тепе-теңдікте деп қарастырылады.

Абсолютті жабық немесе температурасы абсолютті тұрақты жүйелер шын мәнінде кездеспейтін идеал жүйелер. Дегенмен механикада абсолютті қатты зат дейтін түсінік бар, олай болса идеал жүйелер де болады деп жорамалданады. Орташа шаманы анықтаудың екі әдісін де алғаш рет Гиббс ұсынған. Микроканондық орташасы есептелетін жүйелерді Гиббс *микроканондық ансамбль* (оқшауланған жүйе) және *канондық ансамбль* (жабық жүйе) деп атайды. Ансамбльдің бұл екі түрін Гиббс *кіші канондық ансамбльдер* деп, ал канондық орташасы есептелінетін жүйелерді *үлкен канондық ансамбль* деп атаған.

«Ансамбль» деген термин, Гиббстің түсінігі бойынша, бір макрокүйді құрайтын микрокүйлердің шексіз көп саны. Ансамбльдегі микрокүйлер бір-біріне ұқсас, олар табиғаты бірдей бөлшектерден тұрады және қоршаған ортамен әрекеттесу жағдайлары да бірдей деп есептеледі. Макроскопиялық параметрлер ансамбльдегі микрожүйелердің бәріне бірдей ортақ. Ансамбль жүйелерінің бір-бірінен айырмашылығы тек механикалық (фазалық) күйлері бойынша ғана. Ансамбльдегі әрбір жүйе жеке микрокүй болып табылады.

Статистикалық теорияның дәлелі бойынша, өте көп (~1023) бөлшектен тұратын жүйелер үшін ансамбльдің үш түрі бір-бірімен эквивалентті, сондықтан оларға ансамбльдің кез келген түрін қолданып бірдей термодинамикалық қасиеттер алуға болады. Сондықтан термодинамикалық жүйені зерттеу үшін таңдалған ансамбль таралу функцияны математикалық есептеуге қолайлы болуы қажет.

Мысалы, *М(p,q,t)* функциясының (параметрінің) *ансамбль бойынша* анықталған белгілі бір *t* уақыттағы *орташа мәні* төмендегі формуламен есептелінеді:

**, (2.1)(1)

мұндағы *ρ(p,q,t)* – фазалық кеңістікте *ықтималдық таралуының тығыздығы*. Оны тағыда *таралу функциясы* деп атайды. Таралу функциясы мына формуламен анықталады:

*ρ (p,q,t) = *, (2.2)

мұндағы*dω (p, q, t)* – жүйенің *t*уақыттағы механикалық күйі *р*және*q*-діңберілгенмәндеріменсипатталатыныныңықтималдығы (мұнда жүйенің күйі *dpdq-*көлемінің дәлдігімен анықталады).

*Таралу функциясы макрокүйдегі әрбір микрокүйдің статистикалық салмағын (үлесін) көрсетеді (анықтама).*

Бұл анықтамадан таралу функциясының элементар (қарапайым) қасиеттері шығады:

1. нормалау

. (2.3)

1. оң белгілілік

*ρ (p, q, t) ≥ 0*. (2.4)

Таралу функциясы статистикалық термодинамиканың негізгі постулатын береді: *жүйенің макрокүйі (3) және (4)- формулаларды қанағаттандыратын таралу функциясымен сипатталады.*

Таралу функциясына мысал ретінде тұрақты *Т* температурадағы жүйенің яғни канондық ансамбльдің таралу функциясын қарастырайық. Функцияның математикалық түрі:

*ρ (p, q) = *, (2.5)

мұндағы *k* = 1,38⋅10-23 Дж/К – Больцман тұрақтысы; *H(p, q)* – Гамильтон функциясы. (5)-теңдеудегі константаның мәні нормалау шартымен анықталады.

Канондық таралудың (5) жеке бір түрі жылдамдық *v* бойынша *Максвелл* таралуы. Бұл таралу газдар үшін дұрыс:

**, (2.6)

мұндағы *m* – газ молекуласының массасы. Өрнек *ρ(v)dv* – молекула жылдамдығының v мен v + dv аралығында жататын мәнге ие болуының ықтималдығын көрсетеді.

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.