2016年春季《统计力学及应用》期中课题

在3维简谐势阱中10个相互作用的粒子组成的系统。系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^{10} \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2} + \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{2} \left(x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 \right) + \sum_{\substack{i,j=1\\i \neq i}}^{10} 4 \left(\frac{1}{r_{i,j}^{12}} - \frac{1}{r_{i,j}^{6}} \right)$$

其中, $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$.系统的温度为 150.

- 1、采用微正则系综,数值求出:
- 1) 粒子 1 在 x 方向上的概率分布, 并验证其归一性;
- 2) 粒子 1 在 p_v 方向上的概率分布; 并验证 x 和 p_v 方向上的概率分布是独立的;
- 2、忽略粒子的相互作用,将系统近似为理想气体,运用粒子数不变的吉布斯分布求出:
- 1) 系统的配分函数、自由能、自由焓、化学势、内禀化学势;
- 2) 粒子 1 在 x 方向上的概率分布, 并与数值结果进行比较;
- 3) 粒子 1 在 p, 方向上的概率分布, 并与数值结果进行比较;
- 4) 粒子1动能的涨落:
- 3、忽略粒子的相互作用,将系统近似为理想气体,运用粒子数可变的吉布斯分布求出:
- 1) 系统的配分函数、以及化学势;
- 2) 粒子1动能的涨落;
- 4、系统的压强 P 是半径 r 的函数,
- 1) 运用维里定理, 数值求出 P(r):
- 2) 采用理想气体近似求出 P(r), 并与数值结果进行比较。