

Układy statystyczne

Jacek Jurkowski, Fizyka Statystyczna

Instytut Fizyki

2015

Stany mikroskopowe i makroskopowe w układzie wielopoziomowym

- N rozróżnialnych cząstek, z których każda może mieć energię $E_1, \dots, E_r$, poziomy energetyczne są zdegenerowane $g_1, \dots, g_r$ krotnie

Stany mikroskopowe i makroskopowe w układzie wielopoziomowym

- N rozróżnialnych cząstek, z których każda może mieć energię $E_1, \dots, E_r$, poziomy energetyczne są zdegenerowane $g_1, \dots, g_r$ krotnie
- stan mikroskopowy albo mikrostan — dowolne przypisanie energii wszystkim cząstkom,

Stany mikroskopowe i makroskopowe w układzie wielopoziomowym

- N rozróżnialnych cząstek, z których każda może mieć energię $E_1, \dots, E_r$, poziomy energetyczne są zdegenerowane $g_1, \dots, g_r$ krotnie
- stan mikroskopowy albo mikrostan — dowolne przypisanie energii wszystkim cząstkom,
- stan makroskopowy — konfiguracja $(n_1, \dots, n_r)$ opisującą liczbę cząstek o danej energii,

Stany mikroskopowe i makroskopowe w układzie wielopoziomowym

- N rozróżnialnych cząstek, z których każda może mieć energię $E_1, \dots, E_r$, poziomy energetyczne są zdegenerowane $g_1, \dots, g_r$ krotnie
- stan mikroskopowy albo mikrostan — dowolne przypisanie energii wszystkim cząstkom,
- stan makroskopowy — konfiguracja $(n_1, \dots, n_r)$ opisującą liczbę cząstek o danej energii,
- liczba wszystkich możliwych stanów mikroskopowych, które realizują daną konfigurację $\underline{n} \equiv (n_1, \dots, n_r)$ (stan makroskopowy) wynosi

$$W(\underline{n}) = N! \frac{g_1^{n_1} \dots g_r^{n_r}}{n_1! \dots n_r!}.$$

Stany mikroskopowe i makroskopowe w układzie wielopoziomowym

- N rozróżnialnych cząstek, z których każda może mieć energię $E_1, \dots, E_r$, poziomy energetyczne są zdegenerowane $g_1, \dots, g_r$ krotnie
- stan mikroskopowy albo mikrostan — dowolne przypisanie energii wszystkim cząstkom,
- stan makroskopowy — konfiguracja $(n_1, \dots, n_r)$ opisującą liczbę cząstek o danej energii,
- liczba wszystkich możliwych stanów mikroskopowych, które realizują daną konfigurację $\underline{n} \equiv (n_1, \dots, n_r)$ (stan makroskopowy) wynosi

$$W(\underline{n}) = N! \frac{g_1^{n_1} \dots g_r^{n_r}}{n_1! \dots n_r!}.$$

- Stan makroskopowy jest realizowany na ogół przez wiele stanów mikroskopowych!

- Ilość stanów mikroskopowych realizujących stan makroskopowy $\underline{n}$

Różne statystyki

- Ilość stanów mikroskopowych realizujących stan makroskopowy $\underline{n}$
- Statystyka cząstek rozróżnialnych (statystyka Maxwella-Boltzmannna)

$$W_{\text{MB}} = N! \frac{g_1^{n_1} \cdots g_r^{n_r}}{n_1! \cdots n_r!} .$$

Różne statystyki

- Ilość stanów mikroskopowych realizujących stan makroskopowy $\underline{n}$
- Statystyka cząstek rozróżnialnych (statystyka Maxwella-Boltzmannna)

$$W_{\text{MB}} = N! \frac{g_1^{n_1} \cdots g_r^{n_r}}{n_1! \cdots n_r!} .$$

- Statystyka cząstek nierozróżnialnych — przypadek bozonów (statystyka Bose-Einsteina)

$$W_{\text{BE}} = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!} .$$

Różne statystyki

- Ilość stanów mikroskopowych realizujących stan makroskopowy $\underline{n}$
- Statystyka cząstek rozróżnialnych (statystyka Maxwella-Boltzmannna)

$$W_{\text{MB}} = N! \frac{g_1^{n_1} \cdots g_r^{n_r}}{n_1! \cdots n_r!}.$$

- Statystyka cząstek nierozróżnialnych — przypadek bozonów (statystyka Bose-Einsteina)

$$W_{\text{BE}} = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!}.$$

- Statystyka cząstek nierozróżnialnych — przypadek fermionów (statystyka Fermiego-Diraca)

$$W_{\text{FD}} = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! n_i!}.$$

Różne statystyki

- Ilość stanów mikroskopowych realizujących stan makroskopowy $\underline{n}$
- Statystyka cząstek rozróżnialnych (statystyka Maxwella-Boltzmannna)

$$W_{\text{MB}} = N! \frac{g_1^{n_1} \cdots g_r^{n_r}}{n_1! \cdots n_r!}.$$

- Statystyka cząstek nierozróżnialnych — przypadek bozonów (statystyka Bose-Einsteina)

$$W_{\text{BE}} = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)! n_i!}.$$

- Statystyka cząstek nierozróżnialnych — przypadek fermionów (statystyka Fermiego-Diraca)

$$W_{\text{FD}} = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! n_i!}.$$

- Gdy $g_i \gg n_i$, to

$$\ln W_{\text{BE}} = \ln W_{\text{FD}} = \sum_i n_i [\ln(g_i/n_i) + 1] = \ln W_{\text{MB}} - \ln N!$$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Szukamy konfiguracji $\underline{n}^*$, która maksymalizuje $\ln W(\underline{n})$ przy dwóch warunkach

$$\sum_i n_i = N \quad \text{oraz} \quad \sum_i n_i E_i = E$$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Szukamy konfiguracji $\underline{n}^*$, która maksymalizuje $\ln W(\underline{n})$ przy dwóch warunkach

$$\sum_i n_i = N \quad \text{oraz} \quad \sum_i n_i E_i = E$$

- Statystyka Maxwella-Boltzmannna

$$n_i^* = N \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i}$$

gdzie $Z(\beta) = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$ oraz $E = -Z^{-1} Z'(\beta)$.

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Szukamy konfiguracji $\underline{n}^*$, która maksymalizuje $\ln W(\underline{n})$ przy dwóch warunkach

$$\sum_i n_i = N \quad \text{oraz} \quad \sum_i n_i E_i = E$$

- Statystyka Maxwella-Boltzmannna

$$n_i^* = N \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i}$$

gdzie $Z(\beta) = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$ oraz $E = -Z^{-1} Z'(\beta)$.

- Opis gazu klasycznego — przejście do ciągłych wartości energii

$$\frac{n_i}{N} = \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i} \longrightarrow \rho(E) dE = \frac{g(E)}{Z(\beta)} e^{-\beta E} dE$$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Szukamy konfiguracji $\underline{n}^*$, która maksymalizuje $\ln W(\underline{n})$ przy dwóch warunkach

$$\sum_i n_i = N \quad \text{oraz} \quad \sum_i n_i E_i = E$$

- Statystyka Maxwella-Boltzmannna

$$n_i^* = N \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i}$$

gdzie $Z(\beta) = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$ oraz $E = -Z^{-1} Z'(\beta)$.

- Opis gazu klasycznego — przejście do ciągłych wartości energii

$$\frac{n_i}{N} = \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i} \longrightarrow \rho(E) dE = \frac{g(E)}{Z(\beta)} e^{-\beta E} dE$$

- Gęstość stanów klasycznych wynosi

$$g(E) = 2\pi(2m)^{3/2} E^{1/2}$$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Szukamy konfiguracji $\underline{n}^*$, która maksymalizuje $\ln W(\underline{n})$ przy dwóch warunkach

$$\sum_i n_i = N \quad \text{oraz} \quad \sum_i n_i E_i = E$$

- Statystyka Maxwella-Boltzmannna

$$n_i^* = N \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i}$$

gdzie $Z(\beta) = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$ oraz $E = -Z^{-1} Z'(\beta)$.

- Opis gazu klasycznego — przejście do ciągłych wartości energii

$$\frac{n_i}{N} = \frac{g_i}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i} \longrightarrow \rho(E) dE = \frac{g(E)}{Z(\beta)} e^{-\beta E} dE$$

- Gęstość stanów klasycznych wynosi

$$g(E) = 2\pi(2m)^{3/2} E^{1/2}$$

- Suma statystyczna wynosi

$$Z(\beta) = \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{3/2}$$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Statystyka Bose-Einsteina

$$n_i^* = \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1}$$

oraz

$$\begin{cases} N &= \sum_i \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1} \\ E &= \sum_i \frac{g_i E_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1} \end{cases}$$

$z = e^{\beta\mu}$, μ — potencjał chemiczny

Stany makroskopowe maksymalizujące $W(\underline{n})$

- Statystyka Bose-Einsteina

$$n_i^* = \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1}$$

oraz

$$\begin{cases} N &= \sum_i \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1} \\ E &= \sum_i \frac{g_i E_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} - 1} \end{cases}$$

$z = e^{\beta\mu}$, μ — potencjał chemiczny

- Statystyka Fermiego-Diraca

$$n_i^* = \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} + 1}$$

oraz

$$\begin{cases} N &= \sum_i \frac{g_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} + 1} \\ E &= \sum_i \frac{g_i E_i}{z^{-1}e^{\beta E_i} + 1} \end{cases}$$

- Układowi fizycznemu odpowiada **przestrzeń fazowa** Γ parametryzowana przez $2n$ zmiennych

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)\} := \{(\underline{q}, \underline{p})\}$$

- Układowi fizycznemu odpowiada **przestrzeń fazowa** Γ parametryzowana przez $2n$ zmiennych

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)\} := \{(\underline{q}, \underline{p})\}$$

gdzie q_i są **położeniami uogólnionymi**, p_i **pędami uogólnionymi**, a n jest liczbą stopni swobody układu

- Układowi fizycznemu odpowiada **przestrzeń fazowa** Γ parametryzowana przez $2n$ zmiennych

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)\} := \{(\underline{q}, \underline{p})\}$$

gdzie q_i są **położeniami uogólnionymi**, p_i **pędami uogólnionymi**, a n jest liczbą stopni swobody układu

- Stanowi czystemu układu odpowiada punkt przestrzeni fazowej, który podlega ewolucji zgodnie z równaniami Hamiltona

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- Układowi fizycznemu odpowiada **przestrzeń fazowa** Γ parametryzowana przez $2n$ zmiennych

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)\} := \{(\underline{q}, \underline{p})\}$$

gdzie q_i są **położeniami uogólnionymi**, p_i **pędami uogólnionymi**, a n jest liczbą stopni swobody układu

- Stanowi czystemu układu odpowiada punkt przestrzeni fazowej, który podlega ewolucji zgodnie z równaniami Hamiltona

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- $H(\underline{q}, \underline{p})$ jest **funkcją Hamiltona**,

- Układowi fizycznemu odpowiada **przestrzeń fazowa** Γ parametryzowana przez $2n$ zmiennych

$$\Gamma = \{(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)\} := \{(\underline{q}, \underline{p})\}$$

gdzie q_i są **położeniami uogólnionymi**, p_i **pędami uogólnionymi**, a n jest liczbą stopni swobody układu

- Stanowi czystemu układu odpowiada punkt przestrzeni fazowej, który podlega ewolucji zgodnie z równaniami Hamiltona

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n.$$

- $H(\underline{q}, \underline{p})$ jest **funkcją Hamiltona**,
- Rozwiązaniem układu Hamiltona spełniającym warunek początkowy $(\underline{q}(0), \underline{p}(0)) = (\underline{q}_0, \underline{p}_0)$ jest **trajektoria** układu.

Definicja

Stanem mieszanym (statystycznym) układu nazywamy dowolny (ciągły) rozkład prawdopodobieństwa na przestrzeni fazowej.

Definicja

Stanem mieszanym (statystycznym) układu nazywamy dowolny (ciągły) rozkład prawdopodobieństwa na przestrzeni fazowej.

Twierdzenie

Stan mieszanym zmienia się w czasie zgodnie z równaniem Liouville'a

$$\frac{\partial \rho_t(\underline{q}, \underline{p})}{\partial t} = \{H, \rho_t\}(\underline{q}, \underline{p}),$$

gdzie $\{f, g\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$ nazywa się **nawiasem Poissona**

Układy zamknięte i izolowane

- ewolucja odbywa się po ustalonej hiperpowierzchni Σ_E energii

- ewolucja odbywa się po ustalonej hiperpowierzchni Σ_E energii
- Czy na powierzchni stałej energii Σ_E można wyróżnić jakiś stan równowagi, do którego dążyłby układ?

- ewolucja odbywa się po ustalonej hiperpowierzchni Σ_E energii
- Czy na powierzchni stałej energii Σ_E można wyróżnić jakiś stan równowagi, do którego dążyłby układ?
- ergodyczność ewolucji

- ewolucja odbywa się po ustalonej hiperpowierzchni Σ_E energii
- Czy na powierzchni stałej energii Σ_E można wyróżnić jakiś stan równowagi, do którego dążyłby układ?
- ergodyczność ewolucji

Definicja

Ewolucję hamiltonowską na hiperpowierzchni Σ_E nazywamy ergodyczną, jeśli trajektoria dla prawie każdego punktu tej hiperpowierzchni przecina dowolnie małe otoczenie dowolnego punktu hiperpowierzchni Σ_E .

Twierdzenie ergodyczne

- średnia czasowa funkcji

$$\langle f \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\underline{x}(t)) dt$$

- średnia czasowa funkcji

$$\langle f \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\underline{x}(t)) dt$$

- średnia przestrzenna funkcji

$$\langle f \rangle_{\Sigma_E} = \frac{1}{|\Sigma_E|} \int_{\Sigma_E} f(\underline{x}) \frac{d\Sigma_E}{|\nabla H|_E},$$

- średnia czasowa funkcji

$$\langle f \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\underline{x}(t)) dt$$

- średnia przestrzenna funkcji

$$\langle f \rangle_{\Sigma_E} = \frac{1}{|\Sigma_E|} \int_{\Sigma_E} f(\underline{x}) \frac{d\Sigma_E}{|\nabla H|_E},$$

Twierdzenie ergodyczne Birkhoffa

Jeśli dla wszystkich funkcji całkowalnych $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ istnieje średnia czasowa oraz równa się ona średniej przestrzennej, to ewolucja jest ergodyczna.

- Jeśli układ statystyczny jest ergodyczny, to podczas ewolucji przebywa on tyle samo czasu w obszarach o jednakowych polach

- Jeśli układ statystyczny jest ergodyczny, to podczas ewolucji przebywa on tyle samo czasu w obszarach o jednakowych polach
- prawdopodobieństwo $P(G)$ znalezienia układu w obszarze G jest proporcjonalne do pola powierzchni G

$$P(G) = \frac{|G|}{|\Sigma_E|}.$$

- Jeśli układ statystyczny jest ergodyczny, to podczas ewolucji przebywa on tyle samo czasu w obszarach o jednakowych polach
- prawdopodobieństwo $P(G)$ znalezienia układu w obszarze G jest proporcjonalne do pola powierzchni G

$$P(G) = \frac{|G|}{|\Sigma_E|}.$$

- Stan równowagi

$$\rho(\underline{x}) = \frac{1}{|\Sigma_E|}.$$

rozkład jednostajny na przestrzeni fazowej

- Jeśli układ statystyczny jest ergodyczny, to podczas ewolucji przebywa on tyle samo czasu w obszarach o jednakowych polach
- prawdopodobieństwo $P(G)$ znalezienia układu w obszarze G jest proporcjonalne do pola powierzchni G

$$P(G) = \frac{|G|}{|\Sigma_E|}.$$

- Stan równowagi

$$\rho(\underline{x}) = \frac{1}{|\Sigma_E|}.$$

rozkład jednostajny na przestrzeni fazowej

- Nie ma jednak gwarancji, że układ statystyczny będzie dążył do osiągnięcia stanu równowagi!

- Jeśli układ statystyczny jest ergodyczny, to podczas ewolucji przebywa on tyle samo czasu w obszarach o jednakowych polach
- prawdopodobieństwo $P(G)$ znalezienia układu w obszarze G jest proporcjonalne do pola powierzchni G

$$P(G) = \frac{|G|}{|\Sigma_E|}.$$

- Stan równowagi

$$\rho(\underline{x}) = \frac{1}{|\Sigma_E|}.$$

rozkład jednostajny na przestrzeni fazowej

- Nie ma jednak gwarancji, że układ statystyczny będzie dążył do osiągnięcia stanu równowagi!
- Potrzebne są dodatkowe warunki: mieszanie, detailed balance (równowaga szczegółowa)!

Układy otwarte — ewolucja bez pamięci

- Równanie ewolucji bez pamięci można zapisać ogólniej jako równanie master

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = L(t)[\rho_t], \quad L — \text{operator Liouville'a}$$

- operator Liouville'a może być w ogólności procesem Markowa na przestrzeni fazowej Γ

- Równanie ewolucji bez pamięci można zapisać ogólniej jako równanie master

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = L(t)[\rho_t], \quad L \text{ — operator Liouville'a}$$

- operator Liouville'a może być w ogólności procesem Markowa na przestrzeni fazowej Γ
- rozwiązanie (symboliczne!) równania Liouville'a jest postaci

$$\rho_t = \exp \left[\int_{t_0}^t L(\tau) d\tau \right] \rho_0 = \Lambda_t \rho_0,$$

- Równanie ewolucji bez pamięci można zapisać ogólniej jako równanie master

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = L(t)[\rho_t], \quad L \text{ — operator Liouville'a}$$

- operator Liouville'a może być w ogólności procesem Markowa na przestrzeni fazowej Γ
- rozwiązanie (symboliczne!) równania Liouville'a jest postaci

$$\rho_t = \exp \left[\int_{t_0}^t L(\tau) d\tau \right] \rho_0 = \Lambda_t \rho_0,$$

- Gdy L nie zależy od czasu otrzymamy

$$\rho_t = \exp[(t - t_0)L] \rho_0$$

- W przypadku hamiltonowskim $L[\rho_t] = \{H, \rho_t\}$

- Równanie ewolucji bez pamięci można zapisać ogólniej jako równanie master

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = L(t)[\rho_t], \quad L \text{ — operator Liouville'a}$$

- operator Liouville'a może być w ogólności procesem Markowa na przestrzeni fazowej Γ
- rozwiązanie (symboliczne!) równania Liouville'a jest postaci

$$\rho_t = \exp \left[\int_{t_0}^t L(\tau) d\tau \right] \rho_0 = \Lambda_t \rho_0,$$

- Gdy L nie zależy od czasu otrzymamy

$$\rho_t = \exp[(t - t_0)L] \rho_0$$

- W przypadku hamiltonowskim $L[\rho_t] = \{H, \rho_t\}$
- W przypadku niehamiltonowskim ewolucję określa **półgrupa dynamiczna** $\{\Lambda_t\}_{t \geq 0}$

- Równanie z pamięcią wywodzi się z ogólnego procesu stochastycznego

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \int_{t_0}^t K(t - \tau) \rho_\tau d\tau$$

- $K(t - \tau)$ jest **jądrem pamięci**

- Równanie z pamięcią wywodzi się z ogólnego procesu stochastycznego

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \int_{t_0}^t K(t - \tau) \rho_\tau d\tau$$

- $K(t - \tau)$ jest **jądrem pamięci**
- Równanie jest nielokalne w tym sensie, że do znalezienia stanu układu w chwili t potrzebna jest wiedza o **całej** ewolucji stanu do chwili t

- Równanie z pamięcią wywodzi się z ogólnego procesu stochastycznego

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \int_{t_0}^t K(t - \tau) \rho_\tau d\tau$$

- $K(t - \tau)$ jest **jądrem pamięci**
- Równanie jest nielokalne w tym sensie, że do znalezienia stanu układu w chwili t potrzebna jest wiedza o **całej** ewolucji stanu do chwili t

Przykład: Hamiltonowska swobodna ewolucja układu N oscylatorów harmoniczych

$$H(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_i^2 \vec{q}_i^2 \right]$$

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- 1 Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- 1 Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- 2 Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabl) charakteryzujących układ

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- ❶ Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- ❷ Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabi) charakteryzujących układ
 - a) Dokonujemy pomiarów r obserwabi, $f^1, \dots, f^r$

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- ❶ Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- ❷ Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabl)
charakteryzujących układ
 - a) Dokonujemy pomiarów r obserwabl, $f^1, \dots, f^r$
 - b) Wyznaczamy wartości średnie mierzonych obserwabl $m_1, \dots, m_r$

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- ❶ Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- ❷ Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabl)
charakteryzujących układ
 - a) Dokonujemy pomiarów r obserwabl, $f^1, \dots, f^r$
 - b) Wyznaczamy wartości średnie mierzonych obserwabl $m_1, \dots, m_r$
 - c) Wyznaczamy makrostan związany z tymi obserwablami $\mathcal{K}_{f^1, \dots, f^r}$

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- ❶ Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- ❷ Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabi) charakteryzujących układ
 - a) Dokonujemy pomiarów r obserwabi, $f^1, \dots, f^r$
 - b) Wyznaczamy wartości średnie mierzonych obserwabi $m_1, \dots, m_r$
 - c) Wyznaczamy makrostan związany z tymi obserwablami $\mathcal{K}_{f^1, \dots, f^r}$
 - **Uwaga:** Wyznaczony makrostan powinien być niezmienniczy ze względu na ewolucję w czasie układu fizycznego, tak będzie gdy obserwable będą całkami ruchu!

Jak wyznaczyć stan układu statystycznego?

- ❶ Rozwiązać równanie Liouville'a — zazwyczaj trudne lub niewykonalne
- ❷ Poprzez pomiary konkretnych wielkości fizycznych (obserwabl)
charakteryzujących układ
 - a) Dokonujemy pomiarów r obserwabl, $f^1, \dots, f^r$
 - b) Wyznaczamy wartości średnie mierzonych obserwabl $m_1, \dots, m_r$
 - c) Wyznaczamy makrostan związany z tymi obserwablami $\mathcal{K}_{f^1, \dots, f^r}$
 - **Uwaga:** Wyznaczony makrostan powinien być niezmienniczy ze względu na ewolucję w czasie układu fizycznego, tak będzie gdy obserwable będą całkami ruchu!
 - d) **Zasada maksimum entropii:**

Za stan równowagowy układu przyjmujemy rozkład reprezentatywny makrostanu

$$\mathcal{K}_{f^1, \dots, f^r}$$

Gęstość rozkładu równowagi

- Gęstość rozkładu równowagi $\rho^*(\underline{q}, \underline{p})$ makrostanu $\mathcal{K}_{f^1, \dots, f^r}$ ma postać:

$$\rho^*(\underline{q}, \underline{p}) = Z^{-1}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) \exp \left[- \sum_{j=1}^r \lambda_j f^j(\underline{q}, \underline{p}) \right],$$

gdzie suma statystyczna ma postać

$$Z(\lambda_1, \dots, \lambda_r) = \int_{\Gamma} \exp \left[- \sum_{j=1}^r \lambda_j f^j(\underline{q}, \underline{p}) \right] d\underline{q} d\underline{p}$$

$\underline{q} = (q_1, \dots, q_n)$, $\underline{p} = (p_1, \dots, p_n)$ oraz

$$- \frac{\partial \ln Z(\lambda_1, \dots, \lambda_r)}{\partial \lambda_j} = m_j, \quad j = 1, \dots, r.$$

gdzie $m_j = \int_{\Gamma} f^j(\underline{q}, \underline{p}) \rho(\underline{q}, \underline{p}) d\underline{q} d\underline{p}.$

Entropia stanu równowagi

- Entropia stanu równowagi wynosi

$$S(\rho^*) = k \ln Z + k \sum_{i=1}^r \lambda_i m_r$$

- 1 Formalizm kanoniczny — stosowany do układów zamkniętych, w których energia nie jest zachowana. Ustalona jest średnia energia U wskutek oddziaływania z rezerwuarem. Stan równowagi jest rozkładem reprezentatywnym makrostanu energii

$$\mathcal{K}_H = \left\{ \rho : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^+ ; \int_{\Gamma} \rho(\underline{q}, \underline{p}) d\underline{q} d\underline{p} = 1, \langle H \rangle = U \right\}.$$

- 1 Formalizm kanoniczny — stosowany do układów zamkniętych, w których energia nie jest zachowana. Ustalona jest średnia energia U wskutek oddziaływania z rezerwuarem. Stan równowagi jest rozkładem reprezentatywnym makrostanu energii

$$\mathcal{K}_H = \left\{ \rho : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^+ ; \int_{\Gamma} \rho(\underline{q}, \underline{p}) d\underline{q} d\underline{p} = 1, \langle H \rangle = U \right\}.$$

- 2 Formalizm wielki kanoniczny — stosowany do układów otwartych, w których nie jest stała ani energia, ani liczba cząstek. Ustalone są wartości średnie tych wielkości, a stan równowagi jest rozkładem reprezentatywnym makrostanu energii i liczby cząstek (makrostan ze względu na dwie zmienne losowe).

- 1 Formalizm kanoniczny — stosowany do układów zamkniętych, w których energia nie jest zachowana. Ustalona jest średnia energia U wskutek oddziaływania z rezerwuarem. Stan równowagi jest rozkładem reprezentatywnym makrostanu energii

$$\mathcal{K}_H = \left\{ \rho : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^+ ; \int_{\Gamma} \rho(\underline{q}, \underline{p}) d\underline{q} d\underline{p} = 1, \langle H \rangle = U \right\}.$$

- 2 Formalizm wielki kanoniczny — stosowany do układów otwartych, w których nie jest stała ani energia, ani liczba cząstek. Ustalone są wartości średnie tych wielkości, a stan równowagi jest rozkładem reprezentatywnym makrostanu energii i liczby cząstek (makrostan ze względu na dwie zmienne losowe).
- 3 Formalizm mikrokanoniczny — stosowany do opisu układów izolowanych i zamkniętych, w których hamiltonian $H(\underline{q}, \underline{p})$ jest stałą ruchu. Energia układu jest wówczas zachowana, a ewolucja odbywa się po hiperpowierzchni Σ_E stałej energii.

- Zgodnie z tw. o rozkładzie reprezentatywnym

$$\rho^*(\underline{q}, \underline{p}) = Z^{-1}(\beta) e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})}, \quad Z(\beta) = \int_{\Gamma} e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})} d\underline{q} d\underline{p},$$

β może być jednoznacznie wyznaczona z warunku $U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$

- Zgodnie z tw. o rozkładzie reprezentatywnym

$$\rho^*(\underline{q}, \underline{p}) = Z^{-1}(\beta) e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})}, \quad Z(\beta) = \int_{\Gamma} e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})} d\underline{q} d\underline{p},$$

β może być jednoznacznie wyznaczona z warunku $U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$

- **Entropię** można policzyć z relacji $S = k \ln Z + k\beta U$

- Zgodnie z tw. o rozkładzie reprezentatywnym

$$\rho^*(\underline{q}, \underline{p}) = Z^{-1}(\beta) e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})}, \quad Z(\beta) = \int_{\Gamma} e^{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})} d\underline{q} d\underline{p},$$

β może być jednoznacznie wyznaczona z warunku $U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$

- **Entropię** można policzyć z relacji $S = k \ln Z + k\beta U$
- Jaki jest fizyczny sens mnożnika Lagrange'a β ?