5. Statistická fyzika

Mechanika mnoha bodů v klasickém či Lagrangeově nebo Hamiltonově energetickém popisu nám dává přehlednou informaci o tom, jak se systémy chovají. Dynamické zákony mechaniky určují způsob vývoje poloh těchto částic a jejich hybností (nebo rychlostí). Zadáním přesných počátečních podmínek je tak jasně dané, kam se bude systém vyvíjet a jaké rychlosti budou jednotlivé částice mít.

Existuje důvod, proč není tento popis ideální při studování mnoha částic. Představme si, že máme tři částice, které mají hmotnost m_1, m_2, m_3. Samozřejmě platí impulsové věty, které nám říkají informaci o tom, že celková hybnost i moment hybnosti se zachovají, neboť částice nemáme v žádném externím silovém poli. Jaké ale budou trajektorie jednotlivých částic? Síla působící na první částici bude

$$F_1 = -G\frac{m_1 m_2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}\frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - G\frac{m_1 m_3}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|^2}\frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} = m_1\mathbf{r},$$

jedná se o diferenciální rovnici očividně nezávislou na m_1, ovšem její řešení se bude hledat jen velmi těžce.

Prozatím nedůležité – až na další přednášce.

5.1 Opakování Lagrangeova popisu

Skutečná síla Lagrangeova formalismu spočívá v řešení úloh pomocí zobecněných parametrů. Jedná se však stále o rovnice druhého řádu, které není příliš snadné řešit při složitějších vstupech.

Původní rovnice mechaniky jsou Newtonovy pohybové zákony, konkrétně druhý zákon formuluje diferenciální rovnici

$$F\left(\mathbf{r}(t), \mathbf{r}(t), t\right) = m\mathbf{r}(t),$$

kde neznámou funkcí je poloha $\mathbf{r}$ parametrizovaná časem t. Ekvivalentní formulací je série pro N částic $3N$ Lagrangeových rovnic druhého druhu (Euler-Lagrangeových rovnic variační úlohy $\delta S = 0$)

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^i}\right] - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q^i} = 0,$$

kde index i reprezentuje vždy jednu z $3N$ zobecněných souřadnic q^i resp. zobecněných rychlostí q^i. Funkce $\mathcal{L}$ je zde *Lagrangián* je rozdíl kinetické a potenciální energie

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(q^i, q^i, t) = T(q^i, t) - V(q^i, q^i, t).$$

5.1.1 Tíhové pole

Pohyb v tíhovém poli lze zkoumat pro částici o hmotnosti m. Tato částice se nachází v potenciálu $V = mgh$, kde h je vzdálenost od referenční hladiny. Se standardní volbou souřadného systému platí $V = mg(z - z_0)$, kde $z = z_0$ definuje rovinu nulového potenciálu. Lagrangián částice je proto

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(x^2 + y^2 + z^2\right) - mg(z - z_0).$$

Za zobecněné souřadnice si vezmeme obyčejné kartézské x,y,z, které jsou pro popis pohybu v tíhovém poli nejlepší. Pro zapsání tří Lagrangeových rovnic si nejprve rozepišme jednotlivé derivace

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= mx, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}\right] &= mx, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= 0, \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= my, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y}\right] &= my, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= 0, \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} &= mz, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z}\right] &= mz, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} &= -mg,
\end{aligned}$$

nyní můžeme výrazy dosadit do obecných Euler-Lagrangeových rovnic a získat

$$\begin{aligned}
mx &= 0, \\
my &= 0, \\
mz &= -mg,
\end{aligned}$$

odkud vidíme, že na částici nepůsobí žádné zrychlení ve směrech x a y. Ve směru z existuje zrychlení $z = -g$, které působí proti směru osy z (naše volba byla, že osa z míří vzhůru, tíhové zrychlení však působí směrem dolů). Lze sestrojit vektor zrychlení

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{pmatrix} \equiv \mathbf{g},$$

který je konstantní. Abychom získali hledanou polohu, stačí dvakrát tento vektor integrovat, čímž získáme

$$\mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} x_0 + v_0^x(t-t_0) \\ y_0 + v_0^y(t-t_0) \\ z_0 + v_0^z(t-t_0) - \frac{1}{2}g(t-t_0)^2 \end{pmatrix} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0(t-t_0) + \frac{1}{2}\mathbf{g}(t-t_0)^2.$$

5.1.2 Lineární harmonický oscilátor

Vezměme si nyní jinou potenciální energii. V případě tíhového pole byl úměrná z, nyní si zvolíme tuto energii úměrnou x^2, konkrétně $V = \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2$, kde $x = x_0$ nazveme rovnovážnou polohou, ta odpovídá nulové potenciální energii. Lagrangián má tvar

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(x^2 + y^2 + z^2\right) - \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2,$$

jednotlivé derivace jsou

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= mx, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}\right] &= mx, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= -m\omega^2(x-x_0), \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= my, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y}\right] &= my, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= 0, \\
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} &= mz, & \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z}\right] &= mz, & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} &= 0,
\end{aligned}$$

což vede k rovnicím, které ve směrech y resp. z dávají nulové zrychlení, tedy konstantní rychlost v_0^y resp. v_0^z, což odpovídá poloze

$$y = y_0 + v_0^y(t-t_0), \qquad z = z_0 + v_0^z(t-t_0),$$

ve směru x je však situace složitější. Lagrangeova rovnice II. druhu pro $q^1 = x$ dává

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}\right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = mx + m\omega^2(x - x_0) = 0.$$

Než začneme řešit tuto rovnici, musíme si uvědomit, že se nám nelíbí konstanta $m\omega^2 x_0$. V rovnici je navíc a bylo by vhodné ji nějak odstranit. Nejlepší by bylo přejít k nové souřadnici $X = x - x_0$, ovšem x se nám vyskytuje i v druhé derivaci v prvním členu. My bychom však neradi dostali nějaký netriviální člen – pokud bychom se zbavili zbavili konstanty za získání nového ošklivého členu, nemělo by smysl tuto úpravu dělat. Naštěstí se však žádný nechtěný člen neobjeví, neboť

$$X = x - x_0 \qquad \Rightarrow \qquad x = X + x_0 \qquad \Rightarrow \qquad x = X + x_0 = X,$$

neboť x_0 je konstanta. Rovnice se tedy převede do hezčího tvaru

$$X + \omega^2 X = 0,$$

kde je neznámou funkce $X(t)$. Po jejím nalezení budeme moci zapsat výsledek našeho snažení jako $x(t) = x_0 + X(t)$. Předpokládejme, že by funkce X měla tvar $X(t) = Ae^{\lambda(t-t_0)}$, kde A je libovolná konstanta a λ je konstanta, jejíž tvar musíme najít. Prvně si spočteme derivace

$$X = Ae^{\lambda(t-t_0)}, \qquad X = \lambda Ae^{\lambda(t-t_0)}, \qquad X = \lambda^2 Ae^{\lambda(t-t_0)},$$

nyní můžeme dosadit do rovnice

$$\lambda^2 Ae^{\lambda(t-t_0)} + \omega^2 Ae^{\lambda(t-t_0)} = 0,$$
$$(\lambda^2 + \omega^2)Ae^{\lambda(t-t_0)} = (\lambda^2 + \omega^2)X = 0.$$

Víme, že X je obecně nenulová funkce, proto musí být nula výraz v závorce, tj. $\lambda^2 = -\omega^2$, odtud dostáváme dvě řešení rovnice $\lambda = \pm i\omega$, oba dva tyto výsledky tak definují funkci, která bude rovnici řešit:

$$X_1(t) = A_1 e^{i\omega(t-t_0)}, \qquad X_2(t) = A_2 e^{-i\omega(t-t_0)}, \qquad X(t) = X_1(t) + X_2(t),$$

celkové řešení naší rovnice je proto

$$x(t) = x_0 + A_1 e^{i\omega(t-t_0)} + A_2 e^{-i\omega(t-t_0)},$$

kde x_0 je vstupní poloha v čase t_0, A_1, A_2 jsou integrační konstanty závislé na x_i a v_i (vstupní – iniciační – poloze a rychlosti), jak si ukážeme. Dosaďme do získaného řešení $t = t_0$, poté dostaneme

$$x_i = x_0 + A_1 + A_2 \qquad \Rightarrow \qquad A_1 = x_i - x_0 - A_2,$$

tedy konstanty A_1, A_2 jsou v jistém smyslu propojené skrze dvojici jiných konstant. Nadále uvažujme, že oscilátor začíná v bodě x_0, tedy $x_i = x_0$. Na počátku je oscilátor v rovnovážné poloze. Poté platí $A_1 = -A_2$ a funkce polohy a rychlost mají tvar

$$x(t) = x_0 + A_1\left(e^{i\omega(t-t_0)} - e^{-i\omega(t-t_0)}\right) = x_0 + 2iA_1 \sin\left[\omega(t - t_0)\right],$$
$$v_x(t) = x(t) = 2iA_1\omega\cos[\omega(t - t_0)],$$

opět do rychlosti můžeme dosadit čas t_0 a získat pro $v(t_0) \equiv v_0$

$$v_0 = 2iA_1\omega \qquad \Rightarrow \qquad A_1 = \frac{v_i}{2i\omega} \qquad \Rightarrow \qquad x(t) = x_0 + \frac{v_i}{\omega}\sin[\omega(t - t_0)].$$

Vidíme tedy, že začíná-li oscilátor ve své rovnovážné poloze, nesmí být vstupní rychlost nulová, jinak by se oscilátor neměl důvod pohybovat. Navíc pokud by byla vstupní rychlost nulová, potom by $\omega = 0$ a výraz by přestal dávat smysl. Amplituda kmitání je vidět, že má tvar $A = v_i/\omega$.

5.2 Úvod do Hamiltonova formalismu

Řešení Lagrangeových rovnic druhého druhu je vskutku užitečné, často ale chceme pracovat s jednoduššími rovnicemi. Ve fyzice se snažíme co nejvíce zjednodušovat rovnice, abychom získali co nejprimitivnější matematický zápis ke složitému problému. V Lagrangeových rovnicích se objevují druhé derivace, naším cílem je tak získat sérii rovnic, kde budou pouze první derivace.

Matematika nám toto dovoluje, ale říká, že zaplatíme daň. Abychom z 3N Lagrangeových rovnic druhého řádu získali rovnice prvního řádu, musí jich být 6N, tedy dvojnásobek. V této podkapitole se podíváme na to, jak toho lze docílit.

5.2.1 Kanonické hybnosti

Kanonická hybnost je veličina, která může a nemusí odpovídat hybnostem, které známe z newtonovského popisu. Budeme je také značit p, ovšem nyní $p \neq mv$. Máme množinu 3N zobecněných souřadnic q^i a 3N zobecněných rychlostí q^i, na nichž závisí Lagrangián. Kanonickou hybnosti p_i definujeme vztahem

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^i},$$

jedná se tedy o derivace Lagrangiánu dle i. zobecněné rychlosti.

Vzpomeňme si na harmonický oscilátor, pro němž máme daný Lagrangián

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \left(x^2 + y^2 + z^2 \right) - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

kde jsme zvolili $x_0 = 0\,\mathrm{m}$. Kanonické hybnosti pro harmonický oscilátor jsou

$$p_x = mx, \qquad p_y = my, \qquad p_z = mz,$$

v tomto případě tedy skutečně kanonické hybnosti odpovídají hybnostem, které známe z klasické mechaniky v Newtonově přístupu.

V jakém případě by tato kanonická hybnost neodpovídala původní známé hybnosti? V tom, kdy je potenciální energie závislá na rychlosti. To může být např. magnetické pole nebo částice pohybující se za působení tření po podložce.

5.2.2 Fázový prostor

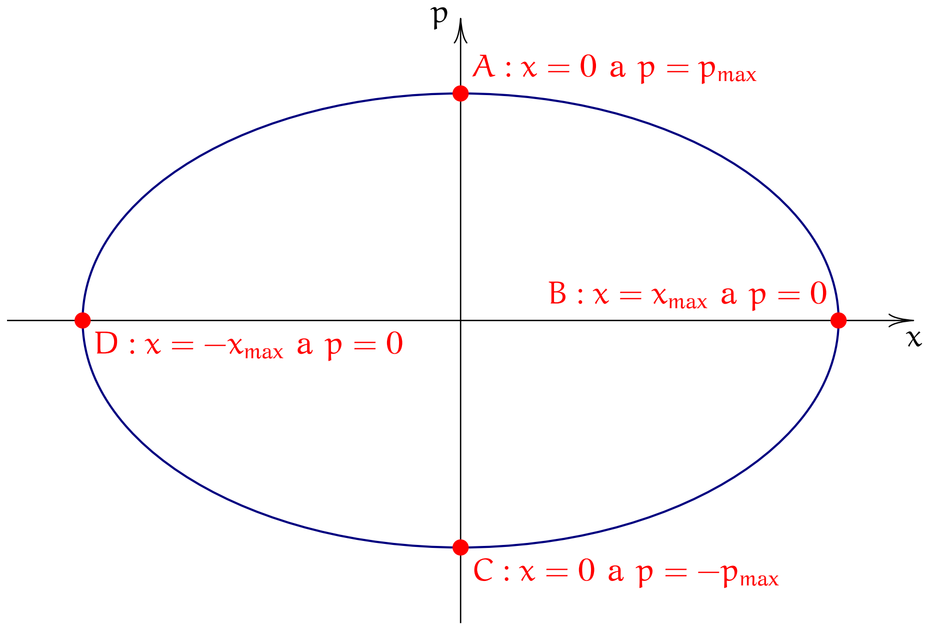
Uvažujme 1D oscilátor, který kmitá s úhlovou frekvencí ω, do jehož rovnovážné polohy umístíme počátek souřadné soustavy. Pro něj víme, že platí

$$x(t) = A \sin[\omega(t - t_0)],$$

kde A je amplituda. Uvažujeme, že oscilátor začíná v čase t_0 v rovnovážné poloze s maximální rychlostí $v_i = v_{max} = A\omega$. Hybnost oscilátoru můžeme také vyjádřit časovou závislostí

$$x(t) = A \sin[\omega(t - t_0)] \qquad \Rightarrow \qquad p(t) = mx(t) = mA\omega \cos[\omega(t - t_0)].$$

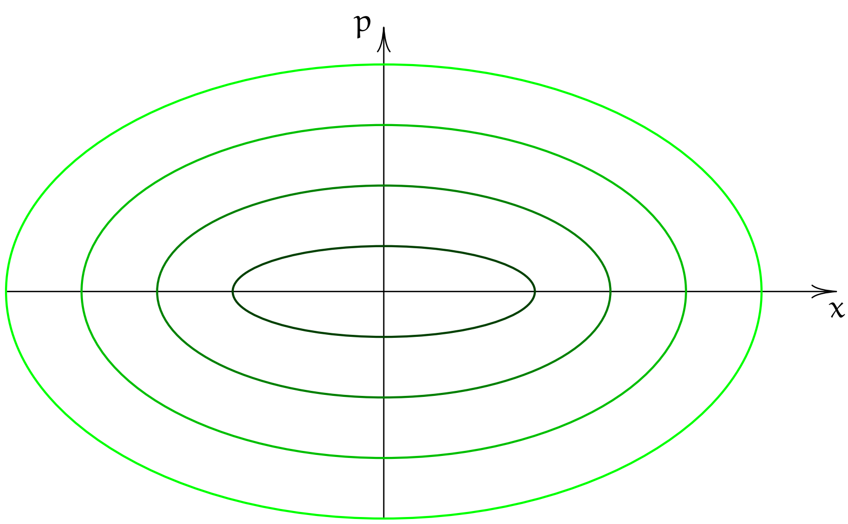
Nedělá nám problém vytvořit graf, který nám ukáže veškeré možné stavy nějakého oscilátoru. Tento graf bude mít na vodorovné ose pozici x a na svislé ose kanonickou hybnost p.



Na počátku pohybu je systém v rovnovážné poloze, kde $x = 0$ a má maximální hybnost p_i, tento stav je na obrázku na pozici A. Ve chvíli, kdy se pohybuje kladným směrem osy x, pohybuje se doprava, jeho hybnost se tím ale snižuje a postupně se dostává do bodu B, kde je maximální výchylka, ovšem nulová rychlost. Síla oscilátoru táhne systém zpátky do rovnovážné polohy, a tak se začne měnit poloha do záporného směru a hybnost bude nejnižší v bodě C. Takto postupně vykreslí bod v grafu elipsu.

Každý bod v tomto grafu, jemuž říkáme fázový portrét, jednoznačně určuje stav systému. Fázový portrét se nachází na fázovém prostoru, což je množina $\mathcal{F} = \{(q^i, p_i) : i = 1, \cdots, 3N\}$. Každý bod fázového prostoru jednoznačně určuje, v jakém stavu se systém nachází, proto bodům fázového prostoru říkáme stavy fyzikálního systému.

Elipsa v obrázku výše popisuje jeden specifický oscilátor. Pokud bychom chtěli fázový portrét více oscilátorů s různými amplitudami a maximálními rychlostmi (uvažujme stejnou frekvenci kmitání), bude obrázek vypadat následovně:



5.2.3 Křivky na fázovém prostoru

Je samozřejmě potřeba nějak určit křivky fázového prostoru. Obecně 6N-dimenzionální grafy nebudeme umět jednoduše nakreslit, proto je potřeba znát časové průběhy všech q^i a p_i. Ty získáme za pomoci speciální funkce, jíž říkáme Hamiltonián. Definujme ji vztahem

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q^i} q^i - \mathcal{L} = \sum_{i=1}^{3N} p_i q^i - \mathcal{L},$$

dá se ukázat, že Hamiltonián je celková energie systému

$$\mathcal{H}(q^i, p_i, t) = T(q^i, t) + V(q^i, q^i, t),$$

navíc pokud není Lagrangián závislý na čase explicitně, tj. $\partial_t \mathcal{L} = 0$, potom se zachovává hodnota Hamiltoniánu ve všech časech, jinak řečeno: *Platí zákon zachování energie.*

Hamiltonovy kanonické rovnice jsou poté rovnice, které za pomoci Hamiltoniánu vybírají správné křivky ve fázovém prostoru pro daný potenciál V. Rovnice mají tvar

$$q^i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \qquad \text{a} \qquad p_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^i},$$

kde i probíhá 3N hodnot, máme tak 6N rovnic, ale ve všech se vyskytují již pouze první derivace zobecněných souřadnic a kanonických hybností.