

# Statistické systémy

Vojtěch Stránský

FJFI

7. března 2023

# Informace o částici

Částici popisuje:

- $\vec{r}_i(t)$
- $\vec{v}_i(t)$

Z toho lze vyvodit:

- Vzdálenost částic
- Struktura
- Kolize

S čím to souvisí:

- Hustota
- Skupenství

# Termodynamické vlastnosti

- Zavedeme funkci:

$$A(t) = f(\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t))$$

- Funkce  $A(t)$  fluktuuje s  $t$
- Fluktuace se zmenšují se zvětšujícím se systémem
- Termodynamické veličiny reprezentuje průměr  $A$

# Energie

- Díky znalosti vazby dokážeme spočítat potenciální energii pro každou dvojici. Tím i jejich součet
- Součet kinetických energií lze spočítat
- Celková energie je opět součtem
- Celková energie slouží pro kontrolu správnosti systému
- Relativní fluktuace do  $10^{-4}$  jsou přijatelné
- Fluktuace zmenšuje časový krok

- Teplota lze dopočítat z kinetické energie

$$T = \frac{2\langle E_{kin} \rangle}{3Nk_b}$$

- $E(T)$  popisuje vývoj tepla v závislosti na teplotě. Lze simulovat
- Na křivce lze pozorovat latentní teplo
- $c_i = \frac{\partial E}{\partial T}$ . Lze numericky realizovat

# Průměrné kvadratické posunutí

- Nese informaci o difuzi, skupenství

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2 \rangle$$

- V pevném skupenství bude  $\langle \Delta r^2(t) \rangle$  malé
- V kapalině skupenství bude  $\langle \Delta r^2(t) \rangle$  dosahovat (velikost boxu)<sup>2</sup>

# Objem

- Změnu objemu lze získat změnou objemu „supercell“
- Změna objemu vypovídá i o skupenství

# Zdroje

- [https://web.mst.edu/~vojttat/class\\_5403/MolecularDynamics.pdf](https://web.mst.edu/~vojttat/class_5403/MolecularDynamics.pdf)
- <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311509000312>