

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

کلیه امتیازهای این پایان‌نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب این پایان‌نامه در مجلات، کنفرانسها و یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه بوعلی سینا یا استاد راهنمای پایان‌نامه و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت. درج آدرسهای ذیل در کلیه مقالات خارجی و داخلی مستخرج از تمام یا بخشی از مطالب این پایان‌نامه در کنفرانسها و یا سخنرانی‌ها الزامی می‌باشد.

....., Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran.

مقالات خارجی

..... گروه، دانشکده، دانشگاه بوعلی سینا، همدان.

مقالات داخلی



دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه: برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک حالت جامد

عنوان:

شکست تقارن در دستگاه‌های پخش واداشته

استاد راهنما:

دکتر فرهاد جعفر پور

استاد مشاور:

دکتر حسین توکلی

پژوهشگر:

رضوان ترکاشوند

مهر ماه ۱۳۹۲



دانشگاه بوعلی سینا
مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی

عنوان:

شکست تقارن در دستگاه های پخش واداشته

نام نویسنده: رضوان ترکشوند

نام استاد/اساتید راهنما: دکتر فرهاد جعفر پور

نام استاد/اساتید مشاور: دکتر محمد حسین توکلی

دانشکده : علوم پایه

گروه آموزشی: فیزیک

رشته تحصیلی: فیزیک

گرایش تحصیلی: حالت جامد

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد

تاریخ تصویب:

تاریخ دفاع: ۱۳۹۲/۷/۲۸

تعداد صفحات : ۱۴۵

چکیده:

مکانیک آماری تعادلی، حالت های تعادلی ماکروسکوپی دستگاه های متشکل از تعداد زیادی ذره را با استفاده از حالت های میکروسکوپی آنها توضیح و پیش بینی می کند. ویژگی اصلی حالات تعادلی این است که آنها در طول زمان و نیز در برابر آشفتگی های کوچک پایدارند. حالت پایای غیرتعادلی، که در آن جریان های احتمال وجود دارند و اندازه گیری های ناوردا به طور کلی به شکل گیس- بولتزمن نیستند، برخی از پدیده های بسیار جالبی را ارائه می کنند که در دستگاه های تعادلی دیده نمی شوند. مثالهایی از آن عبارتند از گذار فاز ناشی از تحریک مرز و شکست تقارن خودبخودی در دستگاه یک بعدی.

در این پایان نامه به بررسی مدل های یک بعدی دور از تعادل ترمودینامیکی خواهیم پرداخت که در آنها حالت شکست تقارن و همچنین همزیستی دو فاز متقارن رخ می دهد.

واژه های کلیدی: شبکه گازی تصادفی ؛ دفع حجم ؛ حالت پایا ؛ گذار فاز ؛ شکست خودبخودی تقارن

فهرست شکل ها

فصل اول

- شکل (۱): بیشترین کار روی دستگاه..... ۱۱
- شکل (۲): حرکت براونی..... ۱۳
- شکل (۳): شبکه نشان دهنده آهنگ های گذار..... ۱۵
- شکل (۴): پیاده روی تصادفی در یک بعد..... ۱۷
- شکل (۵): ذره لانژون در یک دیواره پتانسیل تحت یک اختلال گرمایی تصادفی..... ۱۸
- شکل (۶) جریان کلی بین دو پیکر بندی در دستگاه مارکوفی..... ۲۱
- شکل (۷): مسیر با پرش های گسسته در دینامیک مارکوفی..... ۲۳
- شکل (۸): مسیر برگشت زمان شکل (۷)..... ۲۴
- شکل (۹): انحراف بزرگ چگالی نهایی در ظرفی که از یک گاز پر شده..... ۲۶
- شکل (۱۰): فرایند خروج نامتقارن روی یک حلقه..... ۲۷
- شکل (۱۱): فرایند خروج نامتقارن روی یک زنجیره..... ۲۸
- شکل (۱۲): طرحی از یک موتور مولکولی با هیدرولیز ATP..... ۳۰
- شکل (۱۳): ذره براونی ضامن دار..... ۳۱

فصل دوم

- شکل (۱): فرایند خروج نامتقارن با دو نوع ذره در یک بعد..... ۴۰

فصل سوم

- شکل (۱): نمودار فاز $\beta = 1$ (دقیق). گذار پیوسته بین فاز نمایی و توانی..... ۵۶
- شکل (۲): نمودار میدان متوسط و مونت کارلو برای فاز متقارن توانی..... ۶۲
- شکل (۳): نمودار میدان متوسط و مونت کارلو برای فاز متقارن چگالی پایین..... ۶۳
- شکل (۴): نمودار میدان متوسط و مونت کارلو برای فاز نامتقارن چگالی پایین-چگالی پایین..... ۶۴
- شکل (۵): نمودار میدان متوسط و مونت کارلو برای فاز نامتقارن چگالی بالا-چگالی پایین..... ۶۴
- شکل (۶): نمودار فاز برای $q=1$ ۶۶
- شکل (۷): جریان های $j^+ + j^- / 2$ و $|j^+ - j^-| / 2$ ۶۸
- شکل (۸): چگالی و جریان در میدان متوسط برای $q = 0.5, \beta = 1, N = 32$ ۶۸

فصل چهارم

- شکل (۱): مدل پل با دو اتصال..... ۷۵
- شکل (۲): نمودار فاز میدان متوسط مدل پل برای $K = 1$ ۷۶
- شکل (۳): نمودار های میانگین چگالی برای مثبت ها و منفی ها ، در شبیه سازی مونت کارلو..... ۷۸
- شکل (۴): مسیر پسماند برای گونه ی اکثریت در قسمت پل در ناحیه ی همزیستی..... ۷۹
- شکل (۵): میانگین چگالی مثبت ها در مرکز بخش بر حسب زمان درو فازهای SSB ۸۳
- شکل (۶): دیواره حوزه بازتاب از مرز سمت چپ ، با شبیه سازی مونت کارلو..... ۹۲
- شکل (۷): دیواره حوزه بازتاب از مرز سمت راست..... ۹۳
- شکل (۸): نگاشت بازتابی سمت چپ برای چگالی های مرزی سمت چپ..... ۹۵
- شکل (۹): نگاشت بازتاب سمت راست برای چگالی های مرز سمت راست..... ۹۵
- شکل (۱۰): منحنی های بازتابی سمت چپ و راست که با هم ترکیب شده اند..... ۹۶
- شکل (۱۱): نزدیک شدن به نقطه پایای S از طریق دنباله محدودی از بازتابها..... ۹۶
- شکل (۱۲): منحنی های بازتاب مرزی سمت راست و سمت چپ..... ۹۸

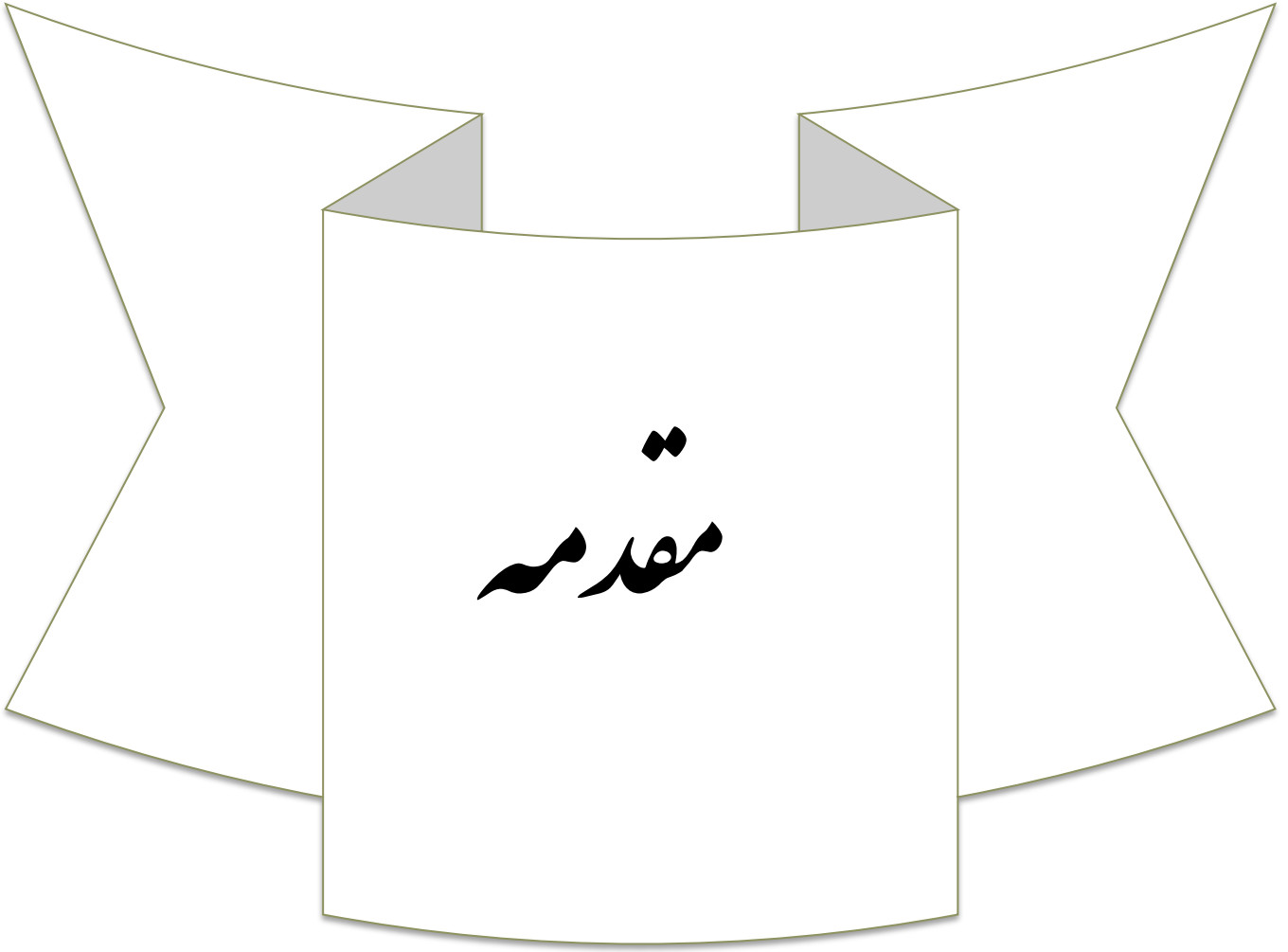
- شکل (۱۳): چهار فرایند پرش اولیه در اینجا برای اولین زنجیر..... ۱۰۲
- شکل (۱۴): جریان J ۱۰۴
- شکل (۱۵): تحول زمانی چگالی میانگین در دو زنجیره برای سه مورد معمولی..... ۱۰۵
- شکل (۱۶): نمودار چگالی در تقریب میدان متوسط برای یک دستگاه با $\nu = 2$ و $N = 200$ ۱۰۶
- شکل (۱۷): نمودار چگالی میانگین به صورتی که از یک ذره‌ی گروه دوم ۱۰۸
- شکل (۱۸): دو مثال از حالات بی ثبات..... ۱۰۹
- شکل (۱۹): توزیع احتمال پایای $\omega(\rho)$ برای دستگاه‌های کوچک در ناحیه‌ی بالا-پایین..... ۱۱۱
- شکل (۲۰): توزیع احتمال پایای $\omega(\rho)$ برای یک دستگاه بزرگ در ناحیه‌ی بالا-پایین..... ۱۱۲
- شکل (۲۱): توزیع پایای $\omega(\rho_1, \rho_2)$ ۱۱۴
- شکل (۲۲): نمودار فاز..... ۱۱۵

فهرست مطالب

فصل اول	۱۴
۱.۱ مکانیک آماری	۵
۱.۱.۱ مکانیک آماری تعادلی	۵
۱.۱.۲ برخی از رویداد های اخیر در فیزیک آماری غیر تعادلی	۶
۱.۲ ترمودینامیک	۸
۱.۲.۱ دو اصل ترمودینامیک	۸
۱.۲.۲ نزدیک تعادل : حرکت براونی و پاسخ خطی	۱۱
۱.۲.۳ چرخ ضامن دار فایمن	۱۴
۱.۳ توصیف ریاضی دینامیک های غیر تعادلی	۱۴
۱.۳.۱ دینامیک های مارکوفی	۱۴
۱.۳.۲ دو مثال	۱۷
۱.۳.۳ ارتباط با ترمودینامیک	۱۹
۱.۳.۴ تغییر ناپذیری برگشت زمانی و تعادل جزئی	۲۰
۱.۳.۵ تعبیر فیزیکی تعادل جزئی	۲۲
۱.۴ قضیه های اف و خیز	۲۴
۱.۴.۱ احتمال وقایع نادر و انحراف بزرگ	۲۴
۱.۴.۲ مثالی از فیزیک غیر تعادلی : فرایند طرد نامتقارن	۲۶
۱.۴.۳ ویژگی های اساسی <i>ASEP</i>	۲۷
۱.۴.۴ تعادل جزئی تعمیم یافته	۲۹
۱.۴.۵ کاربرد موتورهای مولکولی	۳۰
فصل دوم	۳۳
۲.۱ اصول ریاضی در مکانیک آماری	۳۴
۲.۱.۱ فرایند های مارکوف	۳۴

۳۵ معادله چاپمن - کولموگروف $C - K$	۲.۱.۲
۳۶ معادله اصلی	۲.۱.۳
۳۸ حالات ضرب ماتریسی	۲.۱.۴
۴۳	فصل سوم
۴۴	3.1 تعریف مدل
۴۶	۳.۲ حل ماتریسی
۴۷	۳.۲.۱ جواب برای $\alpha = \infty$
۴۸	۳.۲.۲ جواب برای $\beta = 1$
۵۰	۳.۲.۳ نمودار های چگالی و جریان برای $\beta = 1$:
۵۵	۳.۳ تئوری میدان متوسط
۵۷	۳.۳.۱ حل میدان متوسط برای $q = 1$
۶۶	۳.۳.۲ مورد $q \neq 1$
۶۹	۳.۴ شبیه سازی مونت کارلو
۷۰	۳.۵ نتیجه گیری
۶۹	فصل چهارم
۷۳	۴.۱ شکست خودبخودی تقارن در مدل پل تغذیه شده با پیوندگاه ها
۷۳	۴.۱.۱ تعریف مدل
۷۶	۴.۱.۲ نمودار فاز و خط گذار فاز
۷۹	۴.۱.۳ جواب میدان متوسط
۸۳	۴.۱.۴ مکانیسم های پرش بین حالات شکست تقارن در فاز SSB
۸۴	۴.۱.۵ نتیجه
	۴.۲ چگونه شکست تقارن خوبخودی در دستگاه پل با مرزهای <i>PDE - friendly</i> ناپدید می شود
		۸۵
۸۵	۴.۲.۱ تعریف مدل
۸۶	۴.۲.۲ معادلات حد هیدرودینامیکی

منابع مرزی و بردار های تصویر	۴.۲.۳	۸۷
بازتاب نامحدود جبهه های موج از مرزها. عدم وجود شکست خودبخودی تقارن	۴.۲.۴	
	۹۰	
علت رد شدن حد هیدرودینامیکی برای مدل پل	۴.۲.۵	۹۷
نتیجه گیری	۴.۲.۶	۱۰۰
شکست تقارن و همزیستی فازی در یک دستگاه پخش واداشته دو مجرای	۴.۳	۱۰۰
مقدمه	۴.۳.۱	۱۰۱
مدل	۴.۳.۲	۱۰۲
حل عددی	۴.۳.۳	۱۰۵
حد برهمکنش قوی	۴.۳.۴	۱۰۸
نمودار فاز	۴.۳.۵	۱۱۳
نتیجه گیری	۴.۳.۶	۱۱۶
فصل پنجم		۱۱۸
۵.۱ شیه سازی مونت کارلو		۱۱۹
فهرست منابع		۱۴۳



مقدمه

دستگاه های تعادلی به دستگاه هایی گفته می شود که در آنها حالت ماکروسکوپیکی دستگاه با تعدادی از پارامتر های میکروسکوپی مشخص می شود. در این دستگاه ها هیچ شار خالصی از کمیت های فیزیکی مانند گرما یا ذرات عبور نمی کند. تابع توزیع احتمال چنین دستگاه هایی به وسیله تابع توزیع گیبس- بولتزمن^۱ داده می شود. با اینکه پدیده شکست تقارن در دستگاه های تعادلی بسیاری مورد بررسی قرار گرفته، اما این مفهوم برای دستگاه های غیر تعادلی کمتر مورد توجه قرار گرفته است.

در اینجا به مطالعه دستگاه های پخش واداشته می پردازیم. در دستگاه های دور از تعادل شرط تعادل جزئی برقرار نمی شود به این علت که در دستگاهی که در یک حالت پایای غیر تعادلی قرار دارد، یک جریان ماکروسکوپیکی وجود دارد. در چنین دستگاه هایی برگشت زمان هم شکسته می شود. معادله توصیف کننده تحول زمانی تابع توزیع در چنین دستگاهی با تابع گیبس- بولتزمن داده نمی شود. در دستگاه های دور از تعادل تحول تابع توزیع احتمال با معادله اصلی داده می شود.

یک روش مناسب برای پیدا کردن ویژگی های یک نظریه کلی برای دستگاه دور از تعادل، مطالعه مدل های ریاضی است. این مدل ها باید به اندازه کافی ساده باشند تا به صورت دقیق تحلیل شوند. سنگ بنای قضیه ی گذار فاز توسط آیزینگ بنا نهاده شد. طبیعی است که انتظار داشته باشیم که یک نسخه دینامیکی از مدل آیزینگ، یک نقش کلیدی در مکانیک آماری غیر تعادلی ایفا کند. شبکه گازی واداشته، چنین مدل هایی را فراهم می کند. این مدل ها پرش ذرات روی یک شبکه را بیان می کنند. این ذرات در معرض یک نیروی خارجی قرار می گیرند که آنها را وادار به حرکت در یک جهت می کنند که منجر به یک جریان پایای ماکروسکوپیکی در دستگاه می شود. به خاطر وجود این جریان، شرط تعادل جزئی برقرار نمی شود و دستگاه در یک حالت پایای غیر تعادلی قرار می گیرد.

فرایند ساده ی طرد نامتقارن در یک بعد (*ASEP*)؛ یک مدل خاص از شبکه گازی واداشته است. این دستگاه ذره ی تصادفی به عنوان یک مدل بیوفیزیکی برای سنتز پروتئین روی *RNA* و نیز به عنوان یک ابزار کاملاً ریاضی برای مطالعه برهمکنش فرایند مارکوف به کار می رود. متعاقباً، *ASEP* برای مطالعه پدیده های فیزیکی زیادی به کار می رود. مانند: حرکت بزرگ مولکول ها درون

^۱. Boltzmann - Gibbs

لوله‌های باریک، رشد رویه، دنباله صف و موتورهای مولکولی. متغیرهای *ASEP* هم‌چنین به عنوان مدل‌هایی برای ترافیک روان استفاده می‌شود.

مدل طرد کاملاً نامتقارن به موردی که ذرات مجبورند تنها به جلو حرکت کنند مربوط است. این مدل در یک بعد و با شرایط مرزی باز، به صورت دقیق حل شده است. یک روش ساده برای بدست آوردن جواب این است که، حالت پایای دستگاه توسط ماتریس‌های غیر جابجا شونده نشان داده شود. این روش به مورد دستگاهی شامل دو گونه از ذرات متحرک روی یک حلقه تعمیم داده شده است.

در این فصل، مدل طرد کاملاً نامتقارن یک بعدی شامل دو گونه از ذرات را با شرایط مرزی باز بررسی کرده‌ایم. این دو گونه ذره در جهت مخالف هم حرکت می‌کنند. برای راحتی، آنها را ذرات مثبت و منفی نامگذاری می‌کنیم. این مدل دربردارنده یک نمودار فاز غنی است و پدیده غیربدیهی شکست خود بخود تقارن را در یک بعد نشان می‌دهد. در این مدل دستگاه طبق یک قانون دینامیکی تصادفی متحول می‌شود. با تحریک مرزها و تغییر آهنگ‌های ورود و خروج ذرات، برای مقادیر مشخصی از این آهنگ‌ها گذرا فاز اتفاق می‌افتد و دستگاه وارد فاز متفاوتی می‌شود.

با استفاده از تئوری میدان متوسط وجود فازهای شکست تقارن پیش بینی شده است. به منظور بررسی وجود فازهای شکست تقارن در مدل تصادفی و برای تأیید ویژگی‌های کلی نمودار فاز بدست آمده توسط تقریب میدان متوسط، شبیه سازی مونت کارلو را انجام داده ایم. در مدل یک بعدی روی یک زنجیره با دو نوع ذره، دو فاز متقارن و دو فاز نامتقارن شناخته شده است. در فازهای متقارن دستگاه با جابجایی ذرات و مرزهای چپ و راست متقارن باقی می‌ماند، اما در فازهای نامتقارن با این جابجایی‌ها دستگاه تغییر می‌کند. مدل‌های دیگری از طرد کاملاً نامتقارن مانند مدل پل تغذیه شده با پیوندگاه‌ها و مدل دو مجرای و غیره وجود دارد که در اینجا به بررسی این مدل‌ها پرداخته ایم.

۱

اصول مکانیک

آماره

۱.۱ مکانیک آماری

۱.۱.۱ مکانیک آماری تعادلی

هدف از مکانیک آماری تعادلی، توضیح و پیش بینی حالت های تعادلی ماکروسکوپی دستگاه های متشکل از تعداد زیادی ذره، با استفاده از حالت های میکروسکوپی آنها است. ویژگی اصلی حالات تعادلی این است که آنها در طول زمان و نیز در برابر آشفتگی های کوچک پایدارند و تنها با تعداد کمی از متغیر ها شرح داده می شوند. حالت های تعادلی با توجه به ماکرو حالت های داده شده تعریف می شوند.

حال اجازه دهید یادآوری کنیم که حالات تعادلی چگونه در مکانیک آماری مدلسازی شده اند:

یک دستگاه متشکل از N ذره در نظر بگیرید، که برای سادگی آن را یک دستگاه کلاسیکی می گیریم. رشته $\omega = \{C_1 C_2 \dots C_N\}$ نشان دهنده پیکربندی میکروسکوپی یا میکرو حالت های دستگاه است، که در اینجا C_i حالت ذره i ام است. برای بررسی ویژگی های آماری این دستگاه، یک توزیع احتمال $p(\omega)$ در نظر می گیریم که بیان کننده توزیع پایای دینامیک های میکروسکوپی است. سپس یک ماکرو حالت M_N که تابع میکرو حالات $M_N(\omega)$ است در نظر می گیریم.

چیزی که مشاهده می شود این است که $P(M_N)$ اطراف مقادیر محتمل تر متمرکز است. زمانی که تعداد ذرات زیاد باشد این تمرکز واضح تر می شود. این تمرکز $P(M_N)$ از قانون اعداد بزرگ تبعیت می کند؛ به این صورت که مجموعه ای از مقادیر M_N وجود دارد که:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(M_N \in B) = 1 \quad , \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P(M_N \notin B) = 0$$

مجموعه ای کوچکتر B به دسته ای از مقادیر تعادلی یا حالات تعادلی دستگاه مربوط است. خواهیم دید که احتمال انحراف M_N از یکی از مقادیر تعادلی اش به صورت نمایی با اندازه دستگاه کوچک می شود. این انحرافات، افت و خیز دستگاه نامیده می شود.

این تمرکز تابع توزیع احتمال، بیان می کند که چرا نظریه ای انحراف بزرگ، وارد مکانیک آماری شده است. حالت های تعادل با مقادیر نوعی M_N مطابقت دارد و نه با مقادیر متوسط آن. در مکانیک آماری از مقادیر متوسط آن استفاده می شود، زیرا آنها ساده تر از مقادیر نوعی هستند و اگر دستگاهی دارای یک مقدار نوعی منحصر به فرد باشد با مقدار متوسط آن برابر است. حالات تعادل در درجه اول

حالات نوعی هستند که از یک حد پیوسته به نام حد ترمودینامیکی ناشی می‌شوند و این منجر به مفهوم فزونور در مقابل نافزونور می‌شود.

انرژی H_N مربوط به یک دستگاه N ذره ای با برهمکنش کوتاه برد، در حد ترمودینامیکی متمرکز نیست زیرا انرژی چنین دستگاهی فزونور است و واگرا می‌شود. بنابراین نمی‌توان گفت که چنین دستگاهی انرژی تعادلی دارد. اما چیزی که در حد ترمودینامیکی متمرکز است انرژی واحد ذره $h_N = \frac{H_N}{N}$ است که نافزونور است.

حالات تعادل در سطح میکروسکوپی پایداری دارند زیرا افت و خیز اطراف این حالات نامحتمل است و هرچه دستگاه بزرگتر می‌شود بعیدتر می‌شود.

انرژی نهایی H_N یک میکرو حالت در حد ترمودینامیکی متمرکز نیست. همچنین برای میکرو حالت $\frac{H_N}{\sqrt{N}}$ توزیع احتمال پهن می‌شود و یا برای $\frac{H_N}{N^2}$ توزیع احتمال به سمت صفر متمرکز می‌شود و تنها برای $\frac{H_N}{N}$ توزیع متمرکز می‌شود. این برای دستگاه‌های با برهمکنش کوتاه برد درست است و برای دستگاه‌های با برهمکنش‌های بلند برد میکرو حالت‌های انرژی می‌تواند به صورت $\frac{H_N}{N^2}$ یا به طور کلی به صورت $\frac{H_N}{N^\alpha}$ که $\alpha \geq 2$ باشد.

۱.۱.۲. برخی از رویداد های اخیر در فیزیک آماری غیر تعادلی

در این فصل ابتدا قوانین ترمودینامیک کلاسیک و اصول مکانیک آماری را یادآوری می‌کنیم و به این حقیقت تاکید می‌کنیم که افت و خیزهای دستگاهی که در تعادل میکروسکوپی است، مانند حرکت براونی، با مکانیک آماری و نه با ترمودینامیک توضیح داده می‌شود. در نزدیکی تعادل، پذیرفتاری دستگاه برای یک اختلال بسیار کوچک به دامنه افت و خیزهای حالت تعادل مربوط است (رابطه انیشتین). در اینجا روی توصیف دستگاه دور از تعادل با استفاده از دینامیک مارکوفی تمرکز می‌کنیم.

در مکانیک آماری تعادلی، احتمال وقوع یک میکرو حالت برای دستگاهی که با یک منبع در تعادل گرمایی است با قانون گیبس-بولتزمن داده می‌شود. به این صورت که اگر \mathcal{H} هامیلتونی دستگاه باشد، آنگاه توزیع احتمال در فضای پیکر بندی با $e^{-\beta \mathcal{H}}$ متناسب است. در این رابطه β عکس دما است. این دستورالعمل کانونیکی نقطه شروعی برای بررسی دستگاه در تعادل ترمودینامیکی است.

برای یک دستگاه دور از تعادل احتمال وقوع یک ماکرو حالت معین به طور پیوسته با زمان تغییر می‌کند. چنین دستگاهی در حد زمان‌های طولانی ممکن است به یک حالت مانا برسد، که در آن احتمال اندازه‌گیری شده به یک توزیع مانا و خوش تعریف در فضای پیکربندی، همگرا می‌شود.

اگر دستگاه حامل جریان‌های میکروسکوپی (که نشان دهنده برهمکنش و تبادل انرژی یا ماده بین اجزای داخلی دستگاه و یا دستگاه با محیط اطرافش است) باشد، این توزیع مانا با قانون گیس-بولتزمن داده نمی‌شود. در حال حاضر نظریه‌ای وجود ندارد که بتواند حالت‌های مانای دستگاه دور از تعادل را، با استفاده از قوانین دینامیکی حاکم بر تحول آن و شناخت برهمکنش‌های میکروسکوپی بین اجزای دستگاه و یا با محیط اطرافش، پیش بینی کند.

موضوع بحث پیش رو، بررسی ویژگی‌های کلی و قوانین مکانیک آماری غیرتعادلی است. در دستگاه‌های نزدیک به تعادل ترمودینامیکی، نظریه پاسخ خطی منجر به روابط افت و خیز اتلافی می‌شود، اما این روابط برای دور از تعادل برقرار نیستند.

در بخش ۲ به صورت خلاصه اصول ترمودینامیک را یادآوری می‌کنیم و بر روی اصول آماری آن بحث می‌کنیم. در این بخش تاکید می‌کنیم که ترمودینامیک مقادیر متوسط را اندازه‌گیری می‌کند و افت و خیزها فقط با مکانیک آماری می‌تواند محاسبه شود. در نزدیکی تعادل، مثالی از رابطه افت و خیز را با بررسی فرمول انیشتین برای حرکت براونی ارائه می‌دهیم.

در بخش ۳ رویکرد احتمالاتی را برای دینامیک‌های غیر تعادلی، با بررسی دستگاه‌های مارکوفی شرح می‌دهیم. در این بخش استخراج فرمول انیشتین توسط لانژون^۱ (اولین کسی که یک نیروی تصادفی را در معادله نیوتن وارد کرد) را به طور مختصر توضیح می‌دهیم. همچنین توضیح می‌دهیم که رابطه اصلی برقرار شده توسط دستگاه‌های در تعادل ترمودینامیکی، تعادل جزئی است و برخی از ویژگی‌های آن را مرور می‌کنیم.

در بخش ۴ ابتدا توابع انحراف بزرگ را معرفی می‌کنیم و این مفهوم را برای فرایند خروج نامتقارن *ASEP* (یک شبکه گازی واداشته که نمونه‌ای از فیزیک آماری غیرتعادلی است) به کار می‌بریم. سپس تعمیمی از تعادل جزئی را بیان می‌کنیم که برای دسته بزرگی از دستگاه‌های دور از

^۱. Langevin

تبادل برقرار است. در سایه‌ی تعادل جزئی تعمیم یافته بیانی از قضیه‌ی افت و خیز کوهن – گلاووتی^۱ را بدست می آوریم. این بخش را با بررسی موتورهای مولکولی به پایان می بریم.

۱.۲ ترمودینامیک

ترمودینامیک ویژگی‌های ماکروسکوپی ماده (جامد، مایع و ...) را بر حسب تعداد کمی از مشاهده پذیرهای ماکروسکوپی (مانند فشار، حجم، جرم، دما) توصیف می کند؛ البته با فرض اینکه این ویژگی‌ها با زمان تغییر نکنند. قوانین ترمودینامیک به ما این امکان را می دهند که برخی از روابط کلی را از میان این ویژگی‌ها و صرف نظر از ساختار ماده در مقیاس اتمی استخراج کنیم. ترمودینامیک را می توان به عنوان علم تبدیلات انرژی دانست. به منظور برقراری یک تعادل صحیح دو اصل زیر را باید مورد توجه قرار دهیم.

- (i) تمام شکل های انرژی درگیر باید به درستی شناسایی شده و به حساب آورده شوند.
 - (ii) شکل های متفاوت انرژی هم ارز نیستند. بعضی از تبدیلات انرژی بدون هزینه هستند در حالی که برخی دیگر با هزینه و نیازمند جبرانند.
- ترمودینامیک یکی از زیباترین شاخه‌های فیزیک است اما دشوار نیز هست.

۱.۲.۱ دو اصل ترمودینامیک

با مرور مسائل ساده‌ی تبدیل انرژی شروع می کنیم. ساده ترین مثال، تبدیل انرژی مکانیکی به شکل های مختلف (جنبشی و پتانسیل) است. یک توپ که از ارتفاع h سقوط می کند با سرعت $v^2 = 2gh$ به زمین می رسد. در اینجا $g \cong 9.8 \frac{m}{s^2}$ شتاب گرانش است. این مضمون آزمایشی است که گالیله از روی برج پیزا انجام داد. در محاسبات اولیه اصطکاک هوا نادیده گرفته شد. این تبدیل انرژی پتانسیل به جنبشی، بدون هزینه (پایستگی انرژی مکانیکی کل) رخ می دهد. سقوط آزاد یک جسم می تواند برای انجام کار \mathcal{W} (مثلاً اتصال آن به قرقره) مورد استفاده قرار گیرد.

$$\mathcal{W} = \varepsilon_{initial} - \varepsilon_{final} = -\Delta\varepsilon = mgh \quad [۲.۱]$$

فرایندهای بالا بدون اتلاف فرض شده‌اند و در شرایط کاملاً مکانیکی شرح داده شده‌اند. به طور خلاصه آنها کاملاً با زمان برگشت پذیر هستند. برای مثال حرکت آونگ ساعت به ما این امکان را می دهد تا زمان را به وسیله تقسیم آن به دوره‌های زمانی ثابت اندازه بگیریم. اما برای ما جهت زمان را مشخص نمی کند، یعنی می توانیم فیلم نوسان کم اتلاف را به عقب برگردانیم بدون اینکه کسی

^۱. Gallavotti-Cohen

متوجه این کار شود. اما در عمل اندکی اتلاف وجود دارد. توپی که هر بار به زمین برخورد می‌کند و تا ارتفاعی بالا می‌رود را در نظر بگیرید، توپ در هر برخورد بخشی از انرژی خود را از دست می‌دهد و بعد از چند پرش می‌ایستد. البته انرژی کل محفوظ است زیرا آن قسمت از دست رفته به گرما تبدیل شده است.

مضمون اصل اول ترمودینامیک این است که، هنگامی که انرژی محاسبه می‌شود گرما نیز باید به حساب آید. جیمز ژول با کار خود اثبات کرد که کار و گرما، دو راه انتقال انرژی بین محیط و دستگاه هستند که منجر به اصل اول ترمودینامیک می‌شود :

$$\Delta E = \mathcal{W} + Q \quad [2.2]$$

انرژی E در معادله بالا انرژی درونی کل دستگاه است. معادله بالا بیان می‌کند که انرژی کل جهان ثابت است.

هنگامی که اتلاف انرژی وجود داشته باشد، برگشت زمانی در مقیاس ماکروسکوپی از بین می‌رود. فیلم حرکت توپی که به زمین برخورد می‌کند را، اگر به عقب برگردانیم یک فرایند غیرممکن را نمایش می‌دهد. بدین ترتیب که توپ خود به خود با جذب گرما از زمین بالا و بالاتر می‌رود. چنین فرایندی قانون اول ترمودینامیک را نقض نمی‌کند اما در واقعیت هیچ گاه اتفاق نمی‌افتد. به طور خلاصه بعضی از فرایندها امکان پذیرند و بعضی دیگر نه.

اما چگونه می‌توان فرایندهای ممکن و ناممکن را متمایز کرد؟ حل این مشکل با قانون دوم ترمودینامیک امکان پذیر شده که توسط کارنو^۱ (۱۸۲۴)، کلاوسیوس^۲ (۱۸۵۰) و کلونین^۳ (۱۸۵۱) به طور مفصل شرح داده شده است.

دو بیان کلاسیکی از قانون دوم به صورت زیر هستند :

بیان کلاوسیوس : هیچ فرایندی که تنها نتیجه‌ی آن انتقال گرما از جسم سردتر به جسم گرم‌تر باشد، امکان پذیر نیست (نمی‌توان یخچالی ساخت که بدون کار ورودی عمل کند).

^۱. Carnot

^۲. Clausius

^۳. Kelvin

بیان کلوین - پلانک : هیچ فرایندی که تنها نتیجه‌ی آن جذب گرما از یک منبع و تبدیل تمام آن گرما به کار باشد، امکان پذیر نیست (غیر ممکن است یک موتور حرارتی بدون از دست دادن گرما در منبع سرد به کار خود ادامه دهد).

بیان های کلوین - پلانک و کلاوسیوس دو نمونه اصلی از فرایندهای غیر ممکن ساده و کلی را نشان می دهند. می توان نشان داد که این دو گزاره هم ارز و معادلند و تمام موارد ممکن را پوشش می دهند. این دو بیان به این سؤال که آیا فرایند امکان پذیر است یا نه، پاسخ می دهند. با روابط و نگاشت های مناسب یک فرایند غیرممکن همواره می تواند به ماشینی تبدیل شود که بیان کلوین - پلانک یا کلاوسیوس را نقض می کند. تابع حالت آنتروپی که میزان برگشت پذیری و برگشت ناپذیری یک فرایند را مشخص می کند، برای اولین بار با نامعادله کلاوسیوس در سال ۱۸۵۱ بیان شد. اگر و تنها اگر فرایند برگشت پذیر باشد تساوی برقرار می شود.

$$s_2 - s_1 \geq \int_{1 \rightarrow 2} \frac{\partial Q}{T} \quad [2.3]$$

یک نتیجه این نامعادله این است که: هنگامی که جهان به صورت کامل در نظر گرفته می شود، آنتروپی جهان افزایش می یابد. بیان های کلاوسیوس و کلوین - پلانک از قانون دوم را می توان به طور رسمی تر فرمول بندی کرد. به این ترتیب که :

هر فرایند که نتیجه آن کاهش آنتروپی یک دستگاه ایزوله باشد، ناممکن است. گرچه انرژی یک مفهوم آشناست که در بسیاری از فرایندها نقش برجسته ای ایفا می کند، اما نباید فراموش کرد که آنتروپی، بسیاری از پدیده های روزمره را به طور پنهانی تحریک می کند. مانند ذوب یخ. نهایتاً اثرات ترمودینامیکی به علت برهمکنش های انرژی و آنتروپی هستند. یک دستگاه حرارتی تمایل به کمینه کردن انرژی و در عین حال بیشینه کردن آنتروپی خود دارد.

انرژی درونی و آنتروپی تابع حالت هستند. تعادل نامحسوس بین این دو تابع حالت در انرژی آزاد F کدگذاری شده است. این انرژی آزاد یک نقش اساسی در فیزیک آماری دارد. تعبیر انرژی آزاد به عنوان حداکثر کار در دسترس یک تعبیر کلاسیکی است.

$$F = E - TS \quad [2.4]$$

دستگاهی را در نظر بگیرید که از حالت A به حالت B متحول می شود. هر دو این حالات با محیط هم دمما هستند (شکل ۱). با فرض اینکه دستگاه تنها با محیط خود تبادل گرما دارد، کاهش انرژی آزاد، حداکثر کار در دسترس را در دمای معین T می دهد.