

1 Előszó

A fizikai gondolkodás középpontjában álló egyik probléma a mikroszkopikus és a makroszkopikus jelenségek közötti kapcsolat. Közismert, hogy a mechanikai jelenségek (pl. ütközések) megfordíthatók, reverzibilisek. Ugyanakkor a nagyszámú ütközés következtében előálló makroszkopikus folyamat (pl. a rántotta sütés) nem megfordítható, irreverzibilis folyamat. A statisztikus fizika egyik ága megmutatta, hogy a mikrovilágot képviselő részecskék reverzibilis ütközéseiből hogyan származtathatók a makrovilágban megfigyelhető irreverzibilis változások. A mikrovilág és a makrovilág közötti kapcsolattal a statisztikus fizika foglalkozik.

Tekintettel arra, hogy a hővel, általában az energiacsere kérdésével számos gyakorlati kérdés áll kapcsolatban (gondoljon az olvasó a vízmelegítőre, az energiatermelés-átalakításának-hibás szóhasználattal az energiatermelés-problémáira), a kérdéskör a mérnökök érdeklődésének is középpontjában áll. Nincs ez másként a nukleáris energiával kapcsolatos kérdések esetében sem. Jelen munka tárgya a részecskék ütközései révén létrejövő transzportfolyamatok vizsgálata. A munka célja modern tudást adni a jövő mérnökeinek, fizikusainak kezébe az előttük álló, elsősorban a modern energiatermeléshez kapcsolódó (atomerőművek és fúziós berendezések) feladatok megoldásához. A könyv célja nem konkrét recepteket, hanem összefüggéseket, eljárásokat, technikákat megismertetni az olvasóval.

A nukleáris létesítményekben végbemenő folyamatok leírásához elengedhetetlen az alábbi jelenségek megértése:

- turbulens áramlások;
- a neutrongáz viselkedése;
- a plazmajelenségek.

Az első két jelenség többnyire az atomreaktorokban (fissziós reaktorok), a harmadik a fúziós reaktorokban alapvető jelentőségű. A részecskék (fotonok, neutronok, stb.) ütközéseinek törvény-sze-rű-sé-gei-ből megismerhetjük a szóró közeg (pl. szilárd test, oldat, rendezetlen anyag) alapvető jellemzőit, hibáit. A szórásvizsgálatokat számos ipari eljárásban (pl. szegecsek, turbinalapátok) rutinszerűen alkalmazzák.

A fenti jelenségek közös vonása, hogy nagyszámú részecske ütközése során kialakult makroszkopikus állapotokban megfigyelhető jelenségekről van szó. Ez a jelenségkör a transzportelmélet nevet viseli. A transzportelmélet jelenségeinek köre a fentieknél természetesen sokkal általánosabb. Jelen munka célja elméleti alapot biztosítani azokhoz a reaktorokkal kapcsolatos munkákhoz (Monte-Carlo programok írása és használata, neutrontranszport jelenségek numerikus vizsgálata, az áramlási jelenségek numerikus és elméleti vizsgálata, a plazmán végzett mérések értelmezése), amelyekkel naponta találkozunk a reaktorokkal, biztonsági elemzésekkel, tervezéssel kapcsolatos munkák során. Itt jegyzem meg, hogy a

transzport folyamatok ismerete fontos szerepet játszik a neutronok és fotonok anyagvizsgálatban történő felhasználásában is. A modern neutron-spektroszkópia, a sugárvédelem alapjai is rendelkeznek transzportelméleti vonatkozásokkal.

Külön érdemes szót ejteni azokról a folyamatokról, amelyek során nincs lehetőség arra, hogy kialakuljon a lokális termikus egyensúly. A sugárzás következtében kialakuló plazmában, amely egy csillag fotoszférájában alakul ki, nem lehet számítani lokális termikus egyensúly kialakulására. Az ADS[1]. fém céltárgyába becsapódó nagyenergiájú részecskenyaláb leírása szintén nem tételezheti fel termikus egyensúly kialakulását. Ilyen esetekben csak a reménytelennek tűnő feladat marad: meg kell oldani a transzportegyenletet. A megfigyelhető mennyiségek és a lokális fizikai tulajdonságok közötti kapcsolat merőben más, mint egyensúlyi állapotban. Hasonló jelenségeket lehet felhozni a meteorológia, a csillagászat vagy számos mérnöki munka (pl. robbanómotorok tervezése) kapcsán. E feladatok közös jellemzője, hogy az érintett fizikai jelenségek több skálán is megjelennek, általában az atomi (vagy szubatomi) skáláktól a makroszkopikus skáláig. Az USA Energiaügyi Minisztériuma (Department of Energy (DOE)) a XXI. század első éveiben kezdte szervezett keretek közé terelni ezeket a kutatásokat.

Az említett terület-a transzportelmélet - magában foglalja a plazmatranszportot, ahol töltött részecskék mozgását vizsgáljuk, az élő sejtek közötti anyagtranszportot, ami élettani fontosságú kérdés, az épületek és a környezet közötti anyagtranszportot, hogy csak néhányat említsünk a nagyszámú alkalmazások közül. A fenti kérdésekkel több kiadvány is foglalkozik [119], [Kar], [Ivá], [Szent], nem beszélve az interneten elérhető nagyszámú anyagról.

Jelen munka célja a transzportelmélet alapjainak tárgyalása olyan szintig, amely lehetővé teszi a neutronfizikai és plazmafizikai alkalmazások megalapozását. A tárgyalt témák az alapoktól az alkalmazásokig terjednek. A tárgyalás a statisztikus rendszerekkel indul, a statisztikus részecskék eloszlásának vizsgálatától a makroszkopikus állapotfüggvény meghatározásával folytatódik, majd alkalmazások tárgyalásával zárul. Az előadások anyagában az elvi alapokat modellezési technikák (Monte-Carlo-módszer, molekuláris dinamika, S_n és P_n módszer) ismertetése egészíti ki. Külön fejezet foglalkozik a közelítő módszerekkel (véges differenciák, nagy örvény módszer) és egy modern technikával, amely a közelítő módszerek vizsgálatában kapott szerepet az elmúlt évtizedben. Terjedelmi korlátok miatt most ezeket a fejezeteket kihagytuk, csakúgy, mint a véletlen folyamatok alkalmazását is. Az alkalmazások közül a plazmatranszport és a neutronszórás alapjait tárgyaljuk.

Igyekeztem az utóbbi évek eredményeit is felhasználni. Így szót ejtek a kíméletes mérés, a Bose-Einstein-kondenzátum terén az utóbbi években elért eredményekről. A közelítő mód-sze-rek algebrai eszközökkel (nevezetesen az eredeti egyenlet szimmetriáinak meghatározása és a közelítő egyenletek szimmetriáinak vizsgálata)

több, mint tíz éves ugyan, azonban gyors elterjedése a modern számítógépes algoritmusoknak köszönhető.

Feltesszük, hogy az olvasó a jelenségek magfizikai és statisztikus fizikai alapjait ismeri, noha a felhasznált termodinamikai, statisztikusfizikai alapok lényeges részeit megismételjük. A felhasznált matematikai apparátus az analízis, statisztika és absztrakt algebra terén kíván előismereteket. Ezeket az előismereteket a Budapesti Műszaki Egyetem (BME) mérnök-fizikus szakán meghirdetett tárgyak biztosítják. Az érdeklődő olvasó a megadott hivatkozásokból felelevenítheti ismereteit.

A szövegben csak egyszerű bizonyításokat közlünk, az idézett tételek bizonyításának forrását megadjuk, az olvasó ott találja a bizonyítást.

A tárgyalást gyakran megszakítja egy Feladat. Ebben az Olvasó egyszerű példákat talál az éppen tárgyalt kérdéssel kapcsolatban. A Feladat célja többé-kevésbé egyszerű alkalmazások bemutatása.

Jelen munka a BME-en mérnökfizikus hallgatóknak tartott "A neutrontranszport alapjai" és a "Bevezetés a plazmatranszportba" című előadások anyagára épül.

2cm Köszönetnyilvánítás 2cm

Az egyik szerző (MM) ezúton fejezi ki köszönetét azoknak, akiktől az itt közölt anyag jelentős részét tanulta: Fényes Imrének, Geszti Péternek és Pál Lénárdnak. A szerző abban a szerencsében részesült, hogy utóbbi két tanára a jegyzet elkészítésében is tanácsokkal látta el.

2 A statisztikus rendszer

A statisztikus rendszer

2.1 A statisztikus rendszer leírása

A transzportelmélet a statisztikus fizika egyik ága. Mint minden fizikai elmélet, a transzportelmélet vizsgálódásai is egy modell keretében történnek. Ezt a modellt statisztikus rendszernek nevezzük, a rövideg kedvéért a statisztikus jelzõt gyakran elhagyjuk.

Tekintsünk egy rendszert, amely $N \gg 1$ részből áll. A részek közötti kölcsönhatások legyenek fizikai természetűek. A rendszer részei lehetnek

- elemi részecskék (pl. kvarkok, neutronok, protonok, elektronok, fotonok).
- atomok vagy molekulák (pl. hidrogén, hélium, metán, C_{60} molekula, cukor, fehérje, lipid, DNS).

- domének (pl. a legtöbb kristályt nem egyetlen kristályrács alkotja, hanem véges méretű kristályrácsok sokasága. Egy-egy rácsot egy határfelület választ el a szomszédos rácsból. Azt a tartományt nevezzük doménnek, amelyen belül a szerkezet homogén.)

A részek közötti kölcsönhatás lehet közelhatás (pl. ütközés) vagy távolhatás. Ez utóbbit egy erőter közvetíti, az erőteret gyakran egy potenciállal szoktuk leírni. Amennyiben a vizsgált rendszer nem áll kölcsönhatásban más rendszerekkel, zárt rendszerről beszélünk.

A rendszert alkotó részek lehetnek klasszikusak, ekkor a klasszikus mechanika szabályait kell alkalmazni mozgásukra (beszélhetünk pályáról, a rész helye és impulzusa, energiája egy adott időpontban lehet egyszerre meghatározott érték). Ha a részek leírására a kvantummechanika törvényeit kell alkalmazni, akkor érvényes a Pauli-féle kizárási elv, a konjugált mennyiségek nem vehetnek fel egyszerre pontos értéket, érvényes a Heisenberg-féle bizonytalansági elv, nem beszélhetünk pályáról stb. Erről az olvasó a kvantummechanika alapmunkáiban [Marx], [Land3] részletesen tájékozódhat.

A klasszikus részekből álló rendszert röviden klasszikus rendszernek nevezzük. Egy klasszikus rendszerben a részek mozgásegyenleteit fel lehet írni, amennyiben a részekre ható erők ismertek. Minden részt saját mozgásegyenlete ír le, noha a részek között lehet csatolás a kölcsönös erőhatások miatt. A rendszer szabadsági fokainak száma arányos a részek számával. Amennyiben a részeket tömegpontnak tekinthetjük, az egyes részek szabadsági foka a független térkoordináták számával egyenlő, így három dimenzióban a rendszer szabadsági foka a részek száma szorozva hárommal. A pontrendszerek fizikája szerint egy ilyen rendszer mozgásegyenleteit a kezdeti állapot ismeretében meg lehet oldani[2]. A klasszikus rendszer mozgásegyenleteinek megoldása (aszimptotikusan nagy időkre) erősen függ a kezdeti feltételtől. Előfordulhat, hogy a kezdőfeltételek kis megváltozása a rendszer későbbi állapotát jelentősen megváltoztatja. Ezt a jelenséget egy egyszerű közelítésben megvizsgáljuk a következő részben.

A megfigyelések szerint egy klasszikus rendszer állapotát sokkal kevesebb változóval le lehet írni, mint a rendszert alkotó részek száma. Például egy nagyszámú részecskét tartalmazó gáz állapotát nyomása, térfogata, hőmérséklete, és a gáz tömege alapján meg lehet adni. Ezért várható, hogy a mozgásegyenletek vizsgálata túlzottan részletes leírását adja a klasszikus rendszernek. Egyszerűbb leíráshoz vezethet a kapott eredmények alkalmas átlagolása.

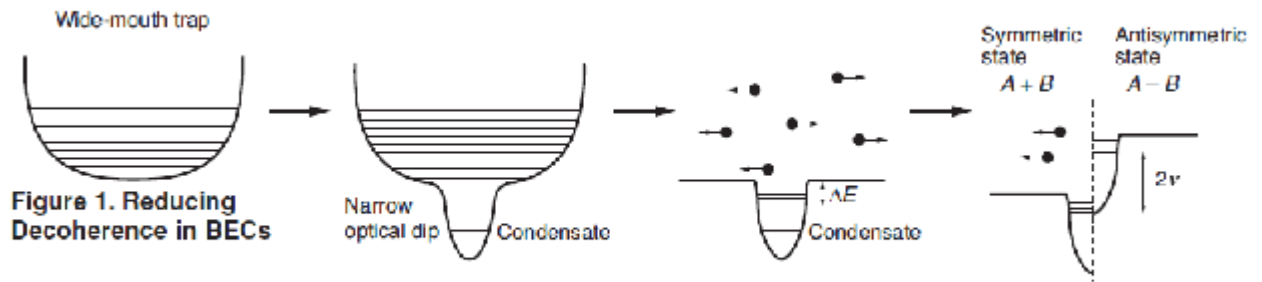
Egy N részecskéből álló rendszer leírását kimerítően megadja a részecskék helye és impulzusa, amennyiben feltesszük, hogy a részecskék közötti kölcsönhatás csak e mennyiségek függvénye. A leíráshoz használt $6N$ dimenziós teret Γ -térnek nevezik. A rendszer állapotát egy $6N$ koordinátával jellemezhető pont adja meg. A részek mozgását a részecskékre ható erők ismeretében megoldható

mozgásegyenletek írják le. Egy alternatív leírási mód a rendszert azzal jellemzi, hány olyan részecske tartózkodik a \mathbf{r} pont adott d^3r infinitezimális környezetében, amelyek sebessége adott \mathbf{v} körüli d^3v infinitezimális térfogatba esik. Ez a leírás egy hatdimenziós térben, a μ -térben megadandó sűrűségfüggvény meghatározását igényli. Lehetséges a vizsgált rendszer jellemzése a makroszkopikus rendszerek leírására használatos fogalmakkal (térfogat, sűrűség, nyomás, hőmérséklet) is. Ezt a leírást hidrodinamikai leírásnak nevezik, a makroszkopikus változókat le lehet származtatni a Γ -térbeli, vagy a μ -térbeli eloszlások segítségével. A dimenziók összehasonlítása is azt mutatja, hogy egy makroszkopikus állapot nagyszámú, egymástól különböző mikroszkopikus állapottal is megvalósítható. Kézenfekvő nem az egyedi mikroszkopikus állapotokat vizsgálni, hanem közvetlenül azon mikroszkopikus állapotok sokaságait, amelyek adott makroszkopikus állapothoz tartoznak. Ezt a Gibbstől származó ötletet is meg lehet valósítani (ld. 7.1. alfejezet).

Amennyiben az \mathcal{S} rendszert fel lehet osztani olyan részekre, hogy egy-egy részen belül a makroszkopikus állapotot egyetlen függvény írja le, azt mondjuk, hogy \mathcal{S} több fázisból áll. Egy fázison belül \mathcal{S} adott része (fázisa) állapotát egy függvény írja le. A fázisok nem mindig különíthetők el geometriai értelemben. Például egy forró csőben áramló folyadék a folyadék és gőz fázisok széles skáláján megvalósítható, a folyadékban található gőz buborékoktól a gőzben található vízcseppekig folytonos az átmenet.

A kvantumos rendszer elnevezést olyan fizikai rendszerekre alkalmazzuk, amelyek részeinek viselkedését a kvantummechanika írja le. Egy ilyen rendszerben a részeket a Schrödinger-egyenlet írja le, a részek leírása hullámfüggvény segítségével történik. A kvantumos rendszer energiája elkenet, ami alatt azt értjük, hogy a nagyszámú rész miatt az energiasajátértékek nagyon közel helyezkednek el, mindig van valamilyen kölcsönhatás a környezettel, ezért lényegében nincs stacionárius állapot. Kis gerjesztés lecsengéséhez is nagy időre van szükség.

Közismert, hogy jellemzően kvantummechanikai jelenségek (pl. a szuperpozíciók léte) nem figyelhető meg makroszkopikus méretekben. Ebből a szempontból érdekes lehet, hol húzódik a makroszkopikus rendszer alsó határa. Ezt jól lehet vizsgálni pl. kétréses interferencia segítségével. Kísérletek szerint hélium illetve hidrogénatomok esetén még megfigyelhető a molekula hullámtermészete. Kastler szerint [Kastl] fontos kérdés lenne annak vizsgálata, hogy a növekvő méretek esetén (pl. fullerén molekula, metán) esetén mikor veszti érvényét a részecske jelleg és adja át helyét a makroszkopikus viselkedésnek. Az átmenet feltehetően folytonos és a nagyobb tömegek miatt egyre nagyobb felbontású, azaz drágább, kísérletekre lenne szükség.



1. ábra. A Bose-Einstein kondenzátum megvalósítása

Az 1990-es évek óta több makroszkopikus állapotban is megfigyeltek szuperponált állapotot, így pl. megfigyelték makroszkopikus számú foton szuperponált állapotát üregrezonátorban, detektálták a C_{60} fullerén molekula anyaghullámainak interferenciáját, és a kvantumszámítógép egységeinek vizsgálatához végzett kísérletek során megvalósították szuperponált állapotban lévő atomokat úgy, hogy az állapot ellenőrzés alatt is tartották. A XXI. század első éveinek eredménye a "Schrödinger-macskája" állapot létrehozása rádiófrekvenciás szupravezető kvantum interferencia (SQUID= superconducting quantum interference device) állapot létrehozása. Egy nemrégiben [LAsci] pedig a Bose-Einstein-kondenzáció (BEK) megvalósítása egy \mathfrak{S} makrorendszerben. Ez utóbbival részletesebben is foglalkozunk.

Több elképzelés is született makroszkopikus BEK állapot létrehozására. Ha vonzó kölcsönhatású bozonokat összezárunk egy potenciálvölgyben és adiabatikusan lehűtjük azokat a bozonok alapállapot energiájáig, kialakulhat makroszkopikus szuperponált állapot. Ha a bozonok számára a potenciálvölgyben rendelkezésre áll két hiperfinom nívó (legyen a két nívó A és B), egy újabb lehetőség nyílik. Kezdetben legyen a BEK minden részecskéje az A állapotban. Gerjesszük az $A \rightarrow B$ átmenet rezonanciafrekvenciájával megegyező rádiófrekvenciájú (RF) impulzussal az atomokat. A RF impulzus legyen rövid a BEK dinamika időállandójához képest. A gerjesztés eredményeként minden atom az A és B állapotok szuperpozíciójában lesz, a BEK egészének makroállapota pedig ilyen egyrészecske állapotok szuperpozícióinak direkt szorzata lesz. Azaz, a sokrészecske-rendszer állapota is egyrészecske állapotfüggvények szorzataként írható fel, vagyis a makroszkopikus állapot is szuperpozíció.

A kezdeti állapot fejlődését leíró Hamilton-operátorban szerepel az atomok közötti vonzó kölcsönhatás, ezért egy idő után beáll a makroszkopikus szuperpozíció állapota, amelyben minden atom egyszerre található az A és B állapotban. A megfelelő állapotfüggvény:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|N_A, 0_B\rangle + |0_A, N_B\rangle), \quad (2.1)$$

ahol a direktorzóratban az A állapotban lévő részecskék száma N_A és a B állapotban lévő részecskék száma N_B van kiírva, a braketek a megfelelő hullámfüggvényeket jelölik.

Kezdetben S nyílt rendszer, hiszen kölcsönhatásban (pl. hőcsere) áll a környezettel. Ez a kölcsönhatás a szuperponált állapotot igen rövid idő alatt lerombolja, ez a dekoherencia. Ha a dekoherencia ideje nagyon rövid lenne, akkor ezen állapotok léte a BEK szempontjából lényegtelenek lennének, hiszen azokat meg sem lehetne figyelni. Elvileg egyetlen ütközés a BEK valamelyik atomja és egy nem kondenzált atom között elegendő a szuperponált állapot megszűnéséhez. A szuperponált állapot dekoherenciájának becsült ideje

$$t_{BEK} \sim \frac{1}{N_E N^2}, \quad (2.2)$$

ahol N az atomok (vagy bozonok) száma a BEK-ban, N_E pedig a nemkondenzált bozonok száma. Mivel XXI. század első éveinek technikája az alábbi korlátokat szabja meg: $1 \leq N_e \leq 10^4$ és $10 \leq N \leq 10^7$, a dekoherencia ideje 16 nagyságrendet is változhat, pl. 1000 sec-tól 10^{-13} sec-ig.

Tekintsük a 1. ábrát, amely a BEK kialakításának elvét mutatja be. A kondenzált állapotot egy széles mágneses csapdában készítjük elő, ebben nagyszámú atomot tartunk fogva. Az atomok a csapdában diszkrét energianívókon helyezkednek el. A csapdában optikai eszközökkel kialakítható egy alacsonyabb energiákat megengedő gödör (ld. a 1. ábra jobbról második részét). A csapdát úgy alakítjuk ki, hogy a gödörben csak egyetlen kötött nívó alakuljon ki. Adiabátikus hűtéssel az atomokat ebbe az állapotba kondenzáljuk. Ezután a mágneses csapdát kinyitjuk (ld. a 1. ábra jobbról harmadik részét), a nem kondenzált atomok többsége elpárolog, ez csökkenti a szuperponált állapotra veszélyes ütközések valószínűségét. Ám azok az atomok még veszélyeztetik a szuperponált állapotot, amely atomok ugyan kötött állapotban vannak, de közel találhatóak a szabad (azaz nem kötött) állapothoz, legyen ezen állapotokhoz tartozó energia ΔE . Ezek az atomok nem párolognak el, ha a BEK egyik atomja ilyen részecskével ütközik, a szuperponált állapot lebomlik. Az ilyen állapotban lévő részecskék számát egy szimmetrizálásnak nevezett eljárással csökkenteni lehet, ezzel az eljárással egyúttal a szuperponált állapot élettartamát is meghosszabbítjuk.

Alkalmazzunk egy ν frekvenciájú RF impulzust, amely alkalmas egy koherens $A \rightarrow B$ átmenet gerjesztésére. A kondenzátum most is makroszkopikus szuperponált állapotban van, de állapota különbözik (1)-től, mert a RF impulzus megváltoztatja a betöltési számokat. Ugyanakkor a nem-kondenzált egyrészecske bozonállapotok energiaspektruma is módosul. Kialakul két energialétra, amelyek egymáshoz képest el vannak tolva 2ν -vel (ld. a 1. ábra negyedik részét). Mindkettőben kötött állapotok alakulnak ki, de az egyik állapotainak energiái lefelé tolódnak el, ezen energiaállapotok felelnek meg az $A \leftrightarrow B$ cserére szimmetrikus

állapotoknak; a másik állapot energiái felfelé tolódnak el, ezek nyilván az $A \leftrightarrow B$ cserére aszimmetrikus állapotoknak felelnek meg. A $\Delta E < 2\nu$ sávba eső állapotokból csak a szimmetrikusak maradnak meg, az aszimmetrikusak elpárolognak. Szerencsére az $A \leftrightarrow B$ cserére szimmetrikus állapotok nem fenyegetik a szuperponált állapotot, mert a Hamilton-operátor is szimmetrikus, ezért a kölcsönhatás csak egy közös fázisszorzót eredményez. A kötött állapotok betöltési számait a lézer intenzitásával szabályozni lehet, ezért a szuperponált állapot élettartamát jelentősen meg lehet hosszabbítani.

A kvantum rendszer hullámfüggvénye nem építhető fel, mert a szükséges információnak csak egy töredékével rendelkezünk. Be lehet viszont vezetni a sűrűségmátrixot (ld. alább).

A statisztikus fizika tárgya egy \mathcal{S} statisztikus rendszer leírása. Feltesszük, hogy \mathcal{S} felbontható részrendszerekre, amelyek között kölcsönhatás állhat fenn. A kölcsönható részrendszerek cserélhetnek anyagot, energiát, impulzust vagy impulzusmomentumot. A kölcsönhatások a gravitációs kölcsönhatást (energiacsere egy formáját) kivéve szigetelhetőek, azaz, megakadályozhatóak. Csak véges méretű rendszerekkel foglalkozunk, az ábrákon \mathcal{S} határa egy zárt vonal (térben pedig egy zárt felület), amely elválasztja a vizsgált statisztikus rendszert a környezettől. A statisztikus rendszer állhat kölcsönhatásban a környezetével (pl. a környezet biztosíthat állandó hőmérsékletet \mathcal{S} számára). Akár klasszikus, akár kvantum leírást használunk, feltesszük, hogy \mathcal{S} állapotának leírása lehetséges az alkotó részek leírása segítségével, vagyis, a rendszer egészének állapotát meghatározza az alkotórészek állapota.

2.1.1 Klasszikus rendszer leírása

Legyen az \mathcal{S} statisztikus rendszer szabadsági fokainak száma s , ekkor leírható s darab általános koordinátával q_1, \dots, q_s , és s darab impulzussal p_1, \dots, p_s . Mivel a rendszer állapota a részek állapotainak direkt szorzata, a rendszer energiája gyakorlatilag folytonosnak tekinthető. \mathcal{S} egy tetszős szerint kiválasztott részrendszere kölcsönhatásban áll a rendszer többi részével. E kölcsönhatás közben energiacsere megy végbe, a kölcsönhatás energiája sokkal nagyobb, mint a rendszer nívói közötti energiakülönbség. Ezért feltehetjük, hogy elegendően hosszú idő alatt a rendszer minden lehetséges állapotát elegendően sokszor veszi fel. Legyen

$$w = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{T} \quad (2.3)$$

ahol Δt az \mathcal{S} rendszer a $\Delta p \Delta q$ térfogatban eltöltött ideje. Vezessük be a $\rho(p, q)$ statisztikus mátrixot az alábbi definícióval:

$$dw = \rho(p, q) dp dq. \quad (2.4)$$

Egy $f(p, q)$ függvény középértéke definíció szerint

$$\langle f \rangle = \int \rho(p, q) f(p, q) dpdq = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int f(t) dt. \quad (2.5)$$

Az ilyen rendszert, amelyben az időátlag megegyezik a sokaságátlaggal, ergodikus rendszernek nevezik. Természetesen a (4)-(5) összefüggések statisztikus jellegűek, akárcsak minden makroszkopikus mennyiség kifejezése. Ennek oka: a statisztikus leírásban nagyszámú változó szerepel (minden részecske impulzusa és helye), miközben a makroszkopikus testek leírásához kisszámú változó is elegendő.

Amennyiben egy makroszkopikus testet írunk le, ez a véletlen jelleg alig látható, mert a makroszkopikus mennyiségek hosszú idejű átlaga alig mutat változást.

Megmutatható, hogy a szórás és az átlagérték hányadosa arányos $1/\sqrt{N}$ -nel.

Amennyiben egy zárt, makroszkopikus rendszer bármely makroszkopikus részrendszerében a részrendszert jellemző összes makroszkopikus fizikai mennyiség nagy relatív pontossággal (ld. fent) megegyezik saját átlagértékével, azt mondjuk, a zárt rendszer statisztikus (termodinamikai) egyensúlyban van. Ha egy kezdeti időpillanatban a zárt makroszkopikus rendszer nincs statisztikus egyensúlyban, az később feltétlenül újra statisztikus egyensúlyi állapotba kerül. Azt az időtartamot, amely alatt a statisztikus egyensúlyba történő átmenet lezajlik, relaxációs időnek nevezzük.

2.1.2 Kvantumos rendszer leírása