

F4110
Kvantová fyzika atomárních soustav
letní semestr 2008 - 2009

III.
Tepelné fluktuace: lineární oscilátor

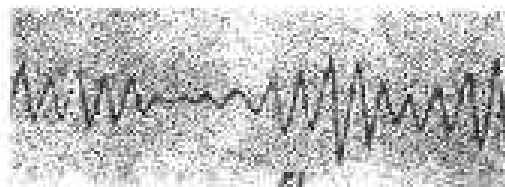
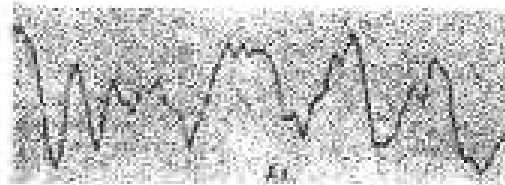
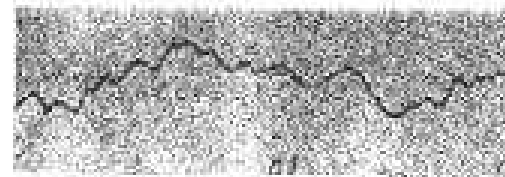
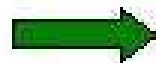
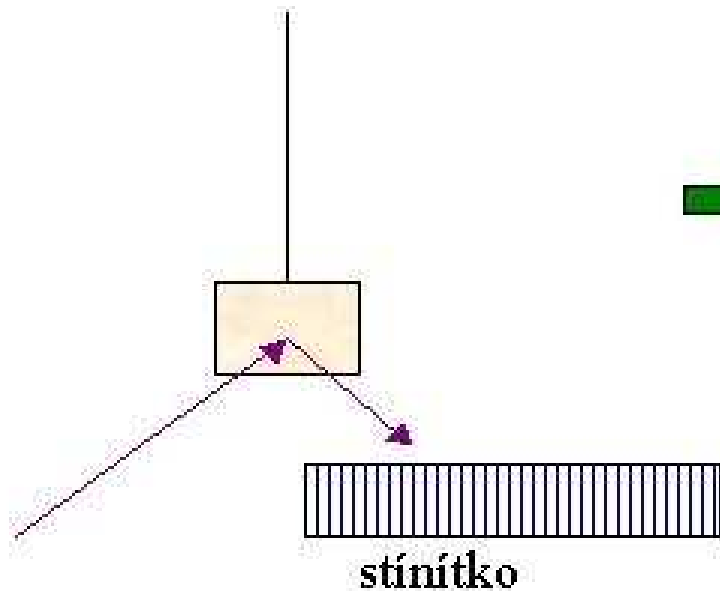
KOTLÁŘSKÁ 4. BŘEZNA 2009

Úvodem

- Podruhé bez Planckovy konstanty
- Molekulární chaos: Fluktuace a stochastická dynamika
- Dvě cesty: ♠ výpočet středních hodnot ♠ přímá simulace jednotlivých realizací náhodných procesů
♠ most: ergodické chování systému v termostatu
- Hlavní formální prostředek dnes:
Langevinova rovnice -- prototyp stochastických diferenciálních rovnic

Poslední folie před týdnem – Kapplerův pokus

1931 Kappler



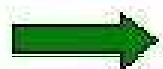
atmosférický tlak

tlak klesá

pot. energie $V = \frac{1}{2} A \varphi^2$

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

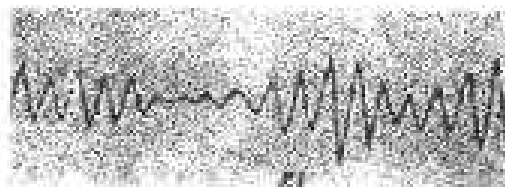
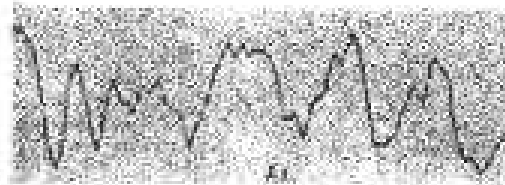
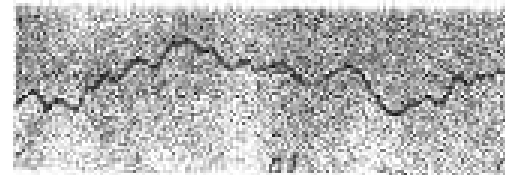
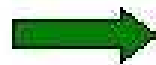
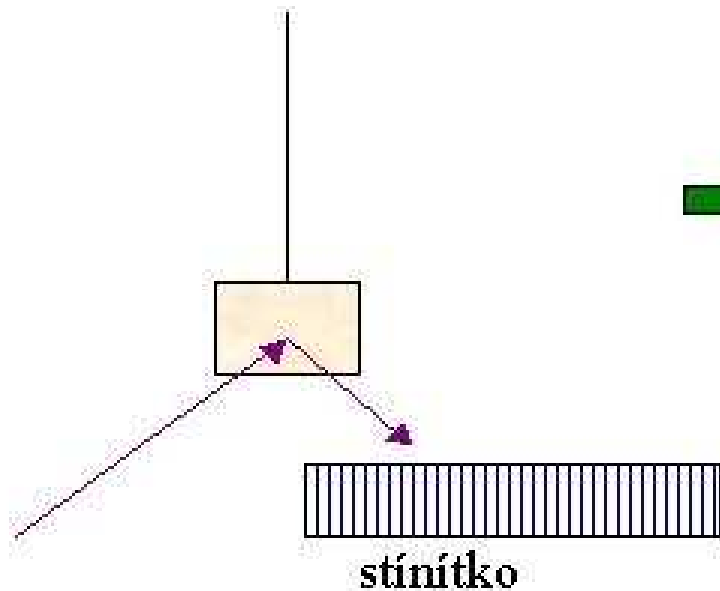
$$R = k_B N_A$$



$$N_A = 6.057 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Poslední folie před týdnem – Kapplerův pokus

1931 Kappler



atmosférický tlak

tlak klesá

pot. energie $V = \frac{1}{2} A \varphi^2$

**Ekvipartiční
zákon**

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

$$R = k_B N_A$$

 $N_A = 6.057 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Ergodičnost

Rovnovážné systémy jsou zvláštní.
Jsou na konci cesty, všechna vnitřní napětí v
systému se vyrovnají a nastane zdánlivý klid.
Pod ním však kolotá věčný molekulární chaos.
Jeho nahodilost se řídí přísnými zákony.
Ať se děje co děje, globální rovnováha nakonec
nesmí být porušena.

Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti 
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) 
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

Bližší pohled na odvození z přednášky

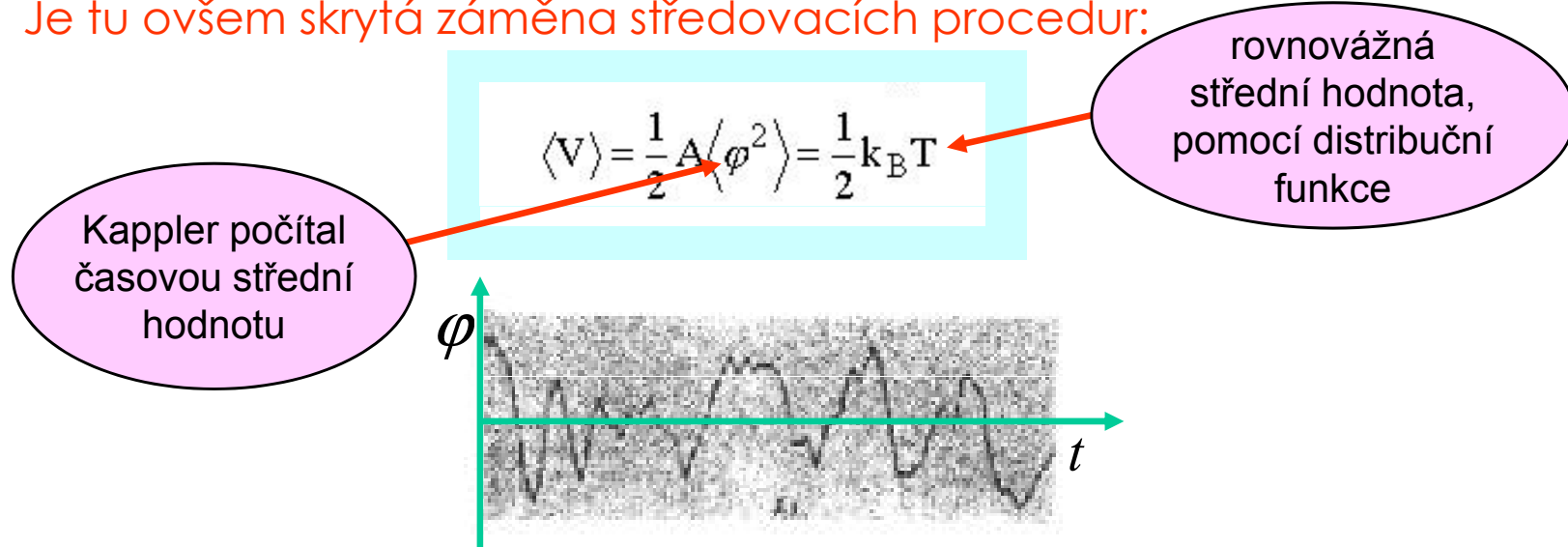
1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti 
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) 
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

rovnovážná
střední hodnota,
pomocí distribuční
funkce

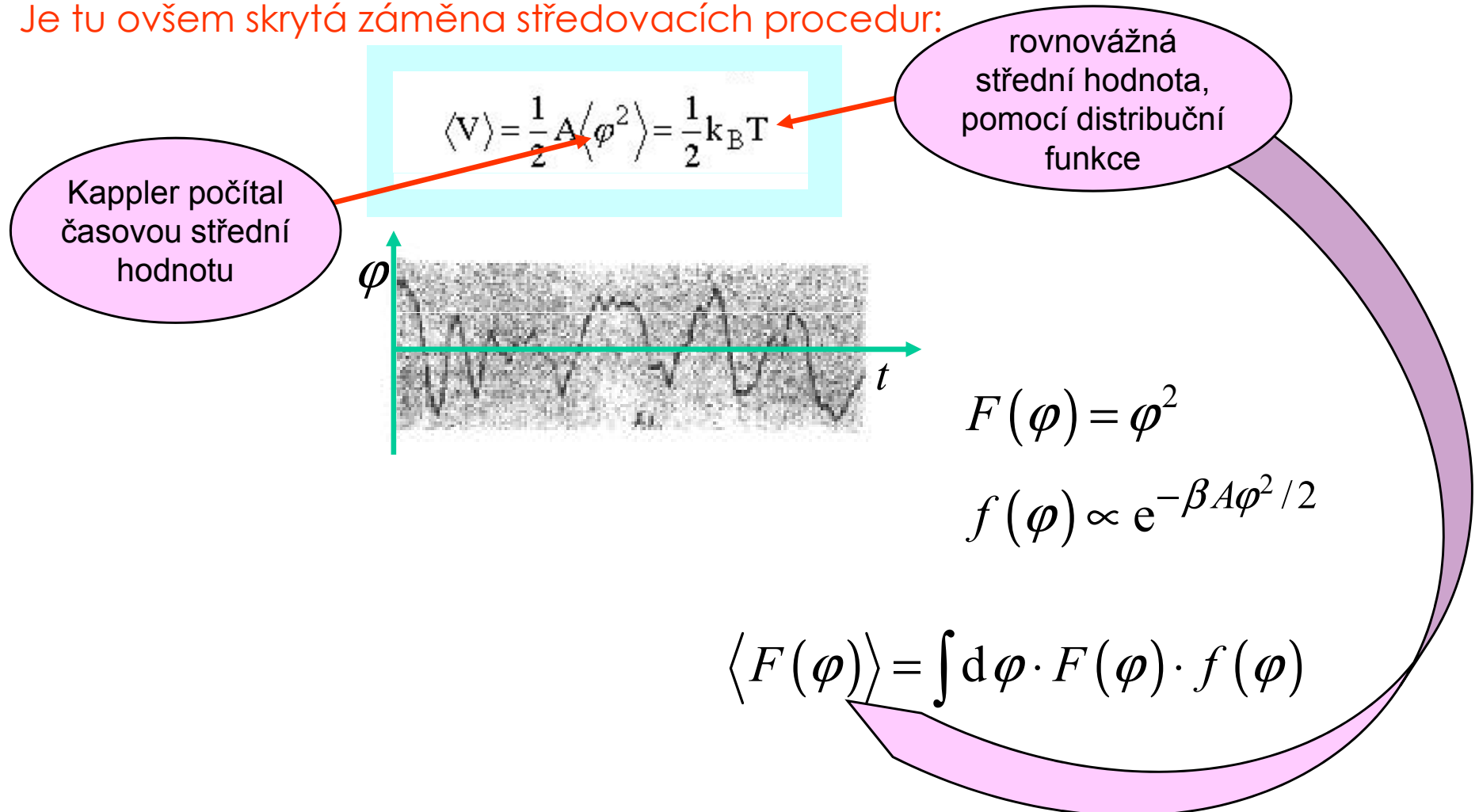
Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \circ
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \circ
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:



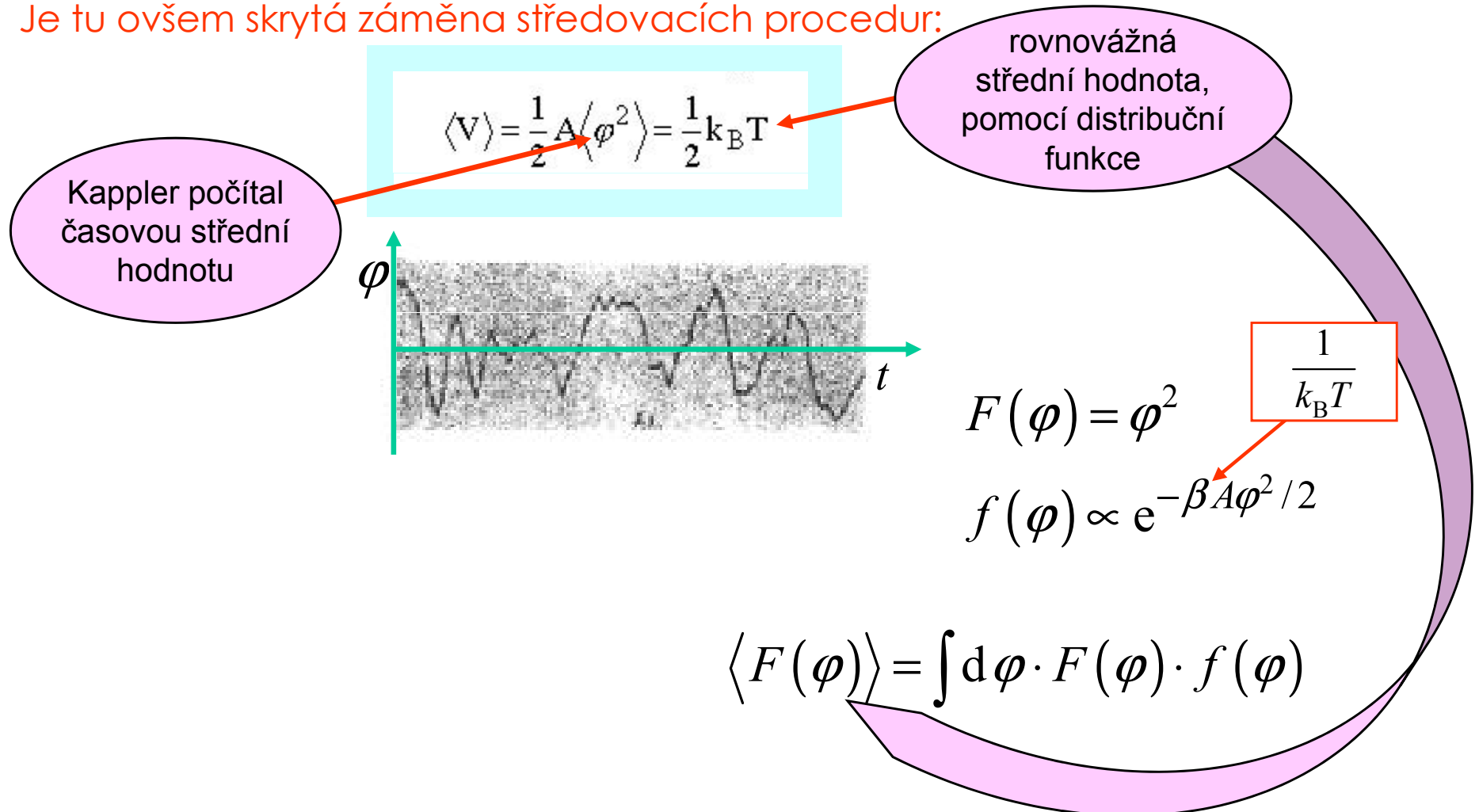
Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \odot
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \odot
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:



Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \odot
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \odot
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:



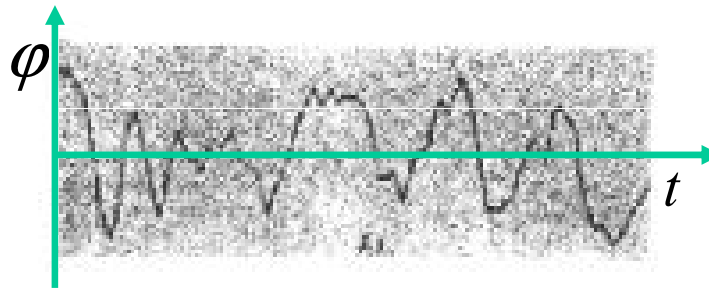
Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za "N + 1" molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \odot
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \odot
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

Kappler počítal časovou střední hodnotu

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

rovnovážná střední hodnota, pomocí distribuční funkce



$$F(\varphi) = \varphi^2$$

$$f(\varphi) \propto e^{-\beta A \varphi^2 / 2}$$

$$\frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt \cdot F(\varphi(t))$$

$$\langle F(\varphi) \rangle = \int d\varphi \cdot F(\varphi) \cdot f(\varphi)$$

Bližší pohled na odvození z přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \odot
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \odot
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

Kappler počítal časovou střední hodnotu

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

rovnovážná střední hodnota, pomocí distribuční funkce



$$F(\varphi) = \varphi^2$$

$$f(\varphi) \propto e^{-\beta A \varphi^2 / 2}$$

ERGODICKÝ PŘEDPOKLAD

$$\frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt \cdot F(\varphi(t)) \approx \langle F(\varphi) \rangle = \int d\varphi \cdot F(\varphi) \cdot f(\varphi)$$

Ergodičnost a molekulární chaos

1. Zrcátko pokládáme za "N + 1" molekulu, která má také své Boltzmann

- Molekulární chaos mění každý dynamický proces na stochastický
- Při opakování vznikají *náhodné realizace* procesu
- Nejčastěji se objeví "typické" realizace
- Pro ně systém bloudí všemi hodnotami uvažované dynamické veličiny a to tak, že u různých hodnot pobývá zhruba podle termické rozdělovací funkce
- Z chaotického chování se tak vynořuje pravidelnost

ČASOVÉ STŘEDNÍ HODNOTY

≡

TERMICKÉ STŘEDNÍ HODNOTY

ERGODICKÁ VĚTA

$$\frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt \cdot F(\varphi(t)) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \langle F(\varphi) \rangle = \int d\varphi \cdot F(\varphi) \cdot f(\varphi)$$

Tlak v plynu a jeho fluktuace

V elementární kinetické teorii se odvozuje výraz pro tlak plynu, který vede ke stavové rovnici.

Na malou plošku působí tlaková síla, která však kolísá – podléhá fluktuacím.

Ta bude hnací silou pro chaotický pohyb mesoskopických objektů.

Tři příklady mesoskopických systémů

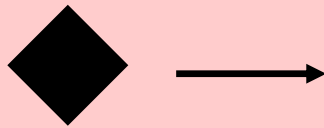
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

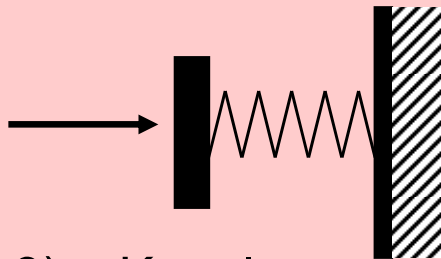
volný translační (+ volný rotační) pohyb



$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \text{rotace}$$

2) pérové váhy

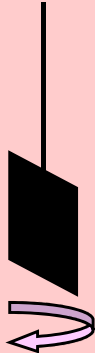
mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Ax^2$$

3) Kapplerovo zrcátko

těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou



$$H = \frac{L^2}{2I} + \frac{1}{2} A\varphi^2$$

Naše volba pro konkrétnost představy

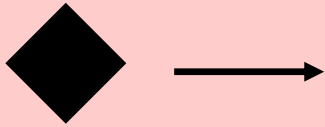
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

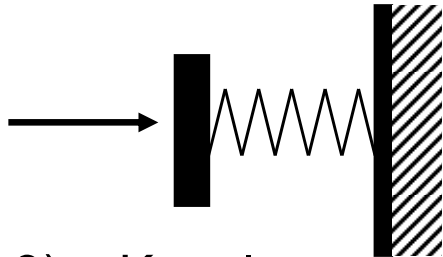
volný translační (+ volný rotační) pohyb



$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \text{rotace}$$

2) pérové váhy

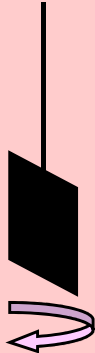
mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Ax^2$$

3) Kapplerovo zrcátko

těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou



$$H = \frac{L^2}{2I} + \frac{1}{2} A\varphi^2$$

Naše volba pro konkrétnost představy

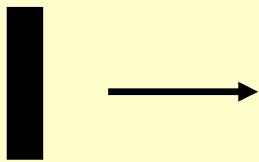
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

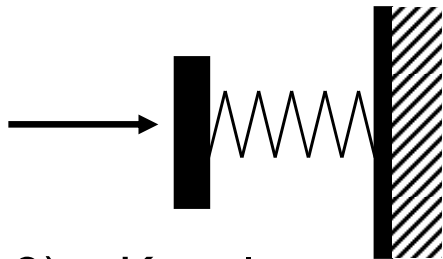
volný translační pohyb v jedné dimenzi



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Ax^2$$

2) pérové váhy

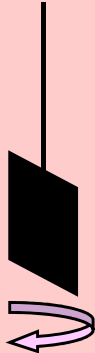
mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Ax^2$$

3) Kapplerovo zrcátko

těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou



$$H = \frac{L^2}{2I} + \frac{1}{2} A\varphi^2$$

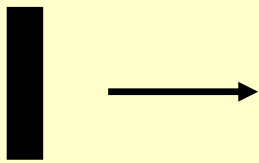
Naše volba pro konkrétnost představy

globální stupně volnosti

- translační
- rotační

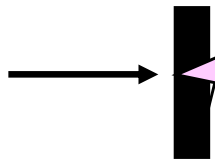
mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice *volný translační pohyb v jedné dimenzi*



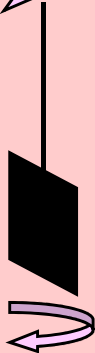
$$H = \frac{p^2}{2m}$$

2) pérové váhy



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Ax^2$$

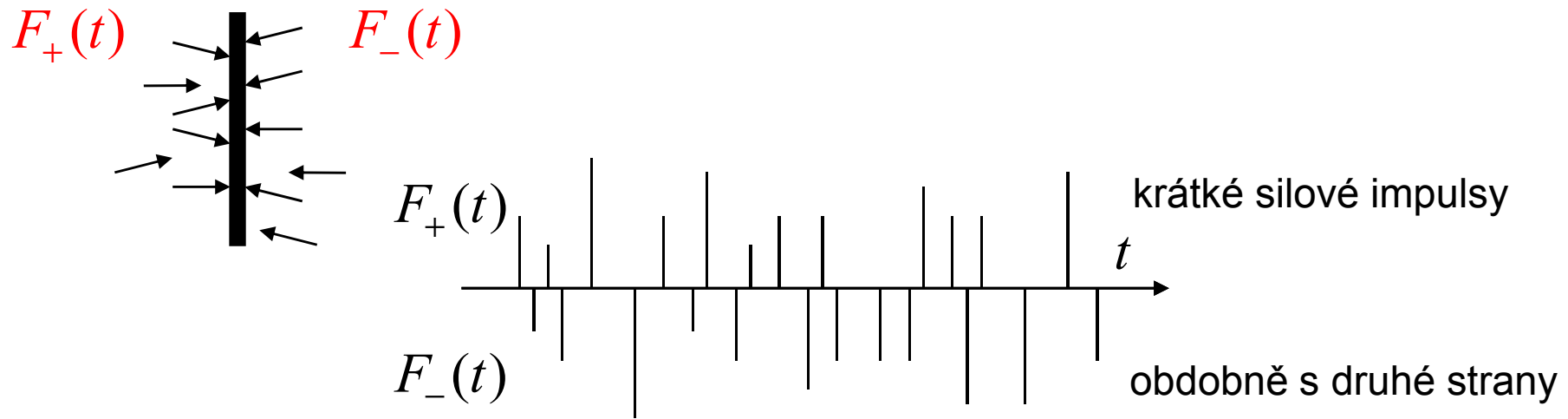
3) Kapplověvo zrcátko *těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou*



$$H = \frac{L^2}{2I} + \frac{1}{2} A\varphi^2$$

NÁHODNÉ SÍLY

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu



Síla na stojící destičku $F_+(t) - F_-(t)$

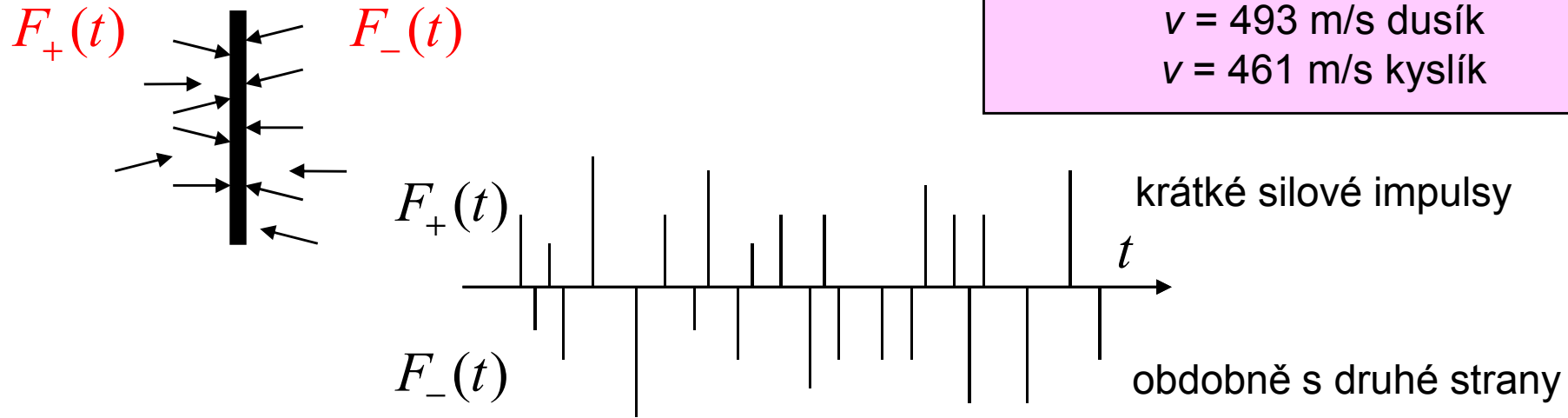
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \times 2mv_x$$

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Odhady pro destičku 1 mm x 1 mm
Vzduch za normálních podmínek 1 atm, 0 C

$n = 2.69 \times 10^{25}$
mezimol. vzdálenost = 3.3 nm
nárazů za sec. = 1.30×10^{22}
 $v = 493$ m/s dusík
 $v = 461$ m/s kyslík



Síla na stojící destičku $F_+(t) - F_-(t)$

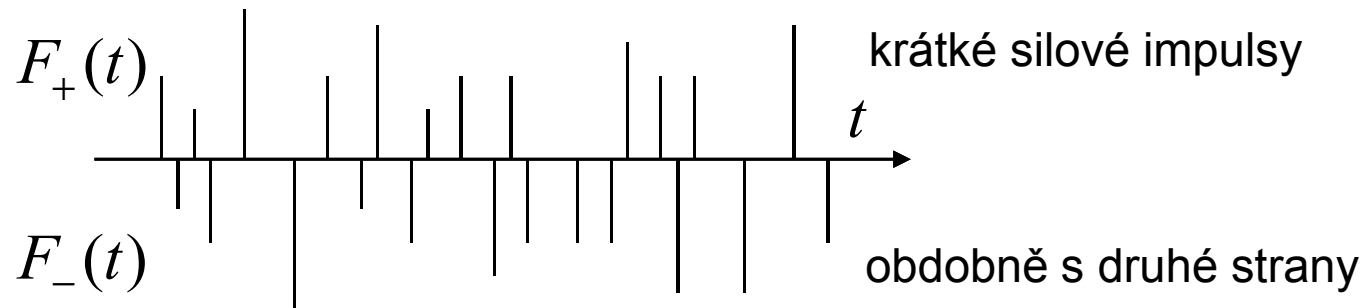
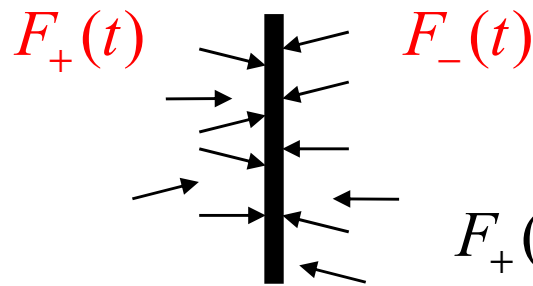
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \times 2mv_x$$

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Odhady pro destičku 1 mm x 1 mm
Vzduch za normálních podmínek 1 atm, 0 C

$n = 2.69 \times 10^{25}$
mezimol. vzdálenost = 3.3 nm
nárazů za sec. = 1.30×10^{22}
 $v = 493$ m/s dusík
 $v = 461$ m/s kyslík



Síla na stojící destičku $F_+(t) - F_-(t)$

$\sim 10^{16}$ nárazů/ μ s

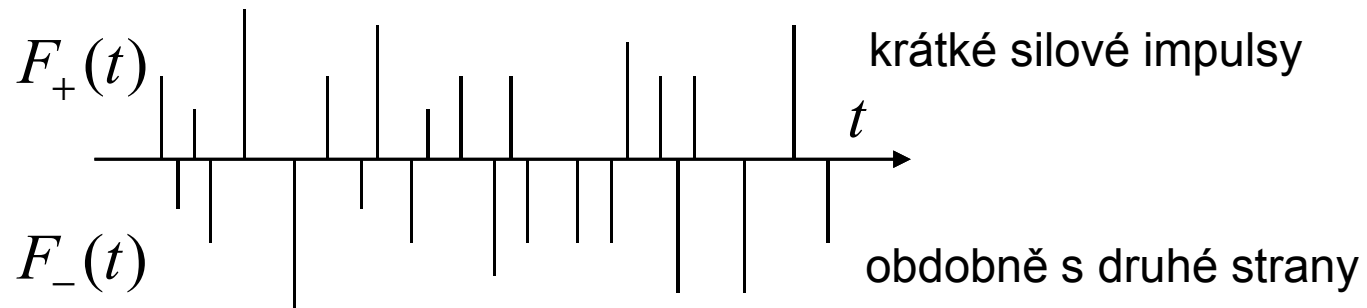
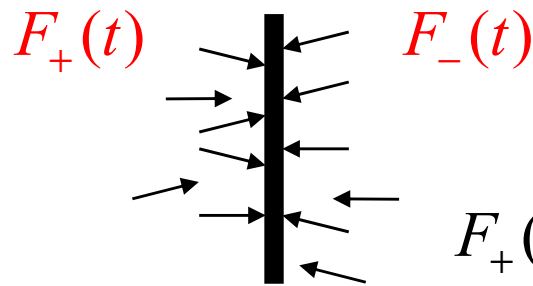
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \times 2mv_x$$

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Odhady pro destičku 1 mm x 1 mm
Vzduch za normálních podmínek 1 atm, 0 C

$n = 2.69 \times 10^{25}$
mezimol. vzdálenost = 3.3 nm
nárazů za sec. = 1.30×10^{22}
 $v = 493$ m/s dusík
 $v = 461$ m/s kyslík



Síla na stojící destičku $F_+(t) - F_-(t)$

$\sim 10^{16}$ nárazů/ μ s

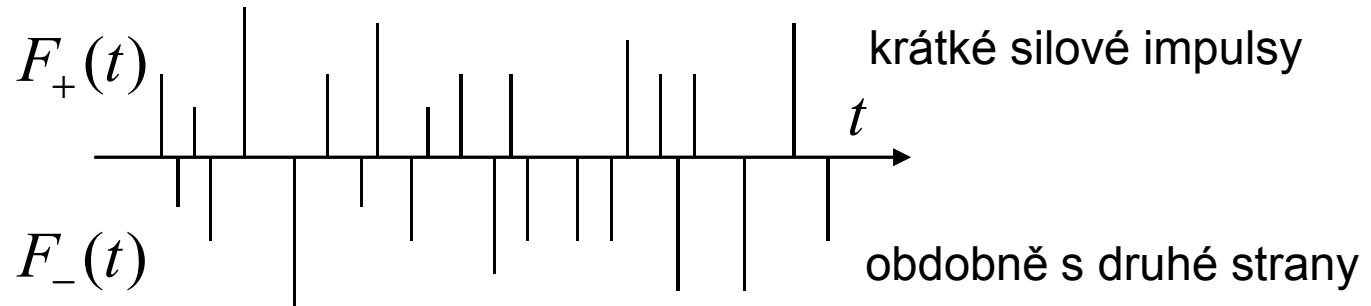
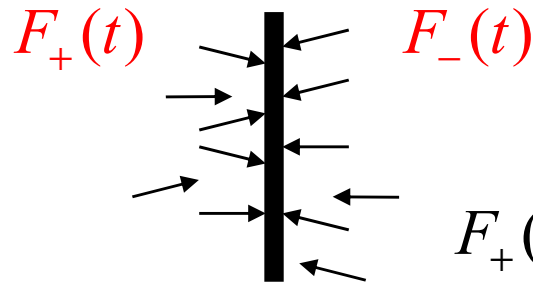
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \times 2mv_x \xrightarrow{\langle \rangle} \tau \cdot n \cdot \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle \cdot S \equiv \tau \cdot p \cdot S$$

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Odhady pro destičku 1 mm x 1 mm
Vzduch za normálních podmínek 1 atm, 0 C

$n = 2.69 \times 10^{25}$
mezimol. vzdálenost = 3.3 nm
nárazů za sec. = 1.30×10^{22}
 $v = 493$ m/s dusík
 $v = 461$ m/s kyslík



Síla na stojící destičku $F_+(t) - F_-(t)$

$\sim 10^{16}$ nárazů/ μ s

Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

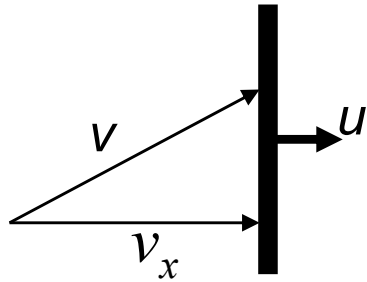
$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \times 2mv_x \xrightarrow{\langle \rangle} \tau \cdot n \cdot \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle \cdot S \equiv \tau \cdot p \cdot S$$

Střední síla na stojící destičku

$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle = pS - pS = 0$$

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku $u \ll \bar{v}$



$$\sum \tau \cdot (v_x - u) \times 2m(v_x - u) \vartheta(v_x - u) \xrightarrow{\langle \rangle}$$

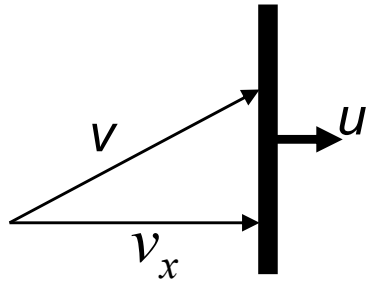
$$n \cdot m \left\langle (v_x - u)^2 \vartheta(v_x - u) \right\rangle \cdot S = p \cdot S - \underbrace{nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + nmO(u^2)$$

$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle$$



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku $u \ll \bar{v}$



$$\sum \tau \cdot (v_x - u) \times 2m(v_x - u) \xrightarrow{\langle \rangle}$$

$$n \cdot m \langle (v_x - u)^2 \rangle \cdot S \equiv p \cdot S - \underbrace{2nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + nm \cancel{O(u^2)}$$

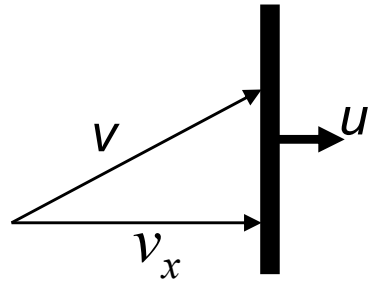
brzdná síla

$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle = pS - pS - \eta \cdot u$$



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku $u \ll \bar{v}$



$$\sum \tau \cdot (v_x - u) \times 2m(v_x - u) \longrightarrow \langle \rangle$$

$$n \cdot m \langle (v_x - u)^2 \rangle \cdot S \equiv p \cdot S - \underbrace{2nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + nm \cancel{O(u^2)}$$

brzdná síla

$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle = \cancel{pS} - pS - \eta \cdot u$$

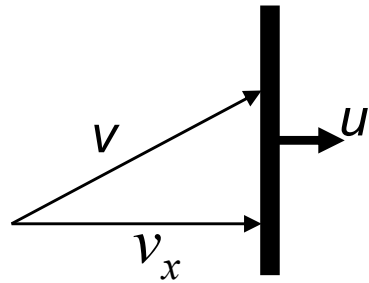
Objevila se disipativní síla úměrná rychlosti !!

Je to důsledek molekulárního chaosu (termostat nereaguje na pohyb systému)



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku $u \ll \bar{v}$



$$\sum \tau \cdot (v_x - u) \times 2m(v_x - u) \xrightarrow{\langle \rangle}$$

$$n \cdot m \langle (v_x - u)^2 \rangle \cdot S \equiv p \cdot S - \underbrace{2nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + nm \cancel{O(u^2)}$$

$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle = \cancel{pS} - pS - \eta \cdot u$$

Objevila se disipativní síla úměrná rychlosti !!
Je to důsledek molekulárního chaosu (termostat nereaguje na pohyb systému)

Náhodná složka síly $F = F_+ - F_- - \langle F_+ - F_- \rangle = F_+ - F_- - (-\eta u)$

$\langle F(t) \rangle = 0$ nulová střední síla

$\langle F(t)F(t') \rangle = \text{const} \times \delta(t - t')$ bodová korelační funkce (bílý šum)

PROČ



Langevinova rovnice

Jednoduchá myšlenka: Na mesoskopickou částici působí fluktuující síla ze strany molekul termostatu.

Pro chaotický pohyb mesoskopických částic můžeme napsat pohybovou rovnici.

Vypadá jako mikroskopická, ale není – náhodná Langevinova síla je zavedena fenomenologicky.

Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem

$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F_{\text{ext}} + F(t)$$

tření

vtištěná síla
(nenáhodná)

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
SÍLA

Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem

$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F_{\text{ext}} + F(t)$$

tření

vtištěná síla
(nenáhodná)

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
SÍLA

Náhodná síla spolu s třením
odrážejí
účinek termostatu na systém

Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem

$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F_S + F(t)$$

tření

působící síla
(nenáhodná)

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
SÍLA

Náhodná síla spolu s třením
odrážejí
účinek termostatu na systém

DVĚ ZÁKLADNÍ STRATEGIE

středování ... LR jako stochastická DR

simulace ... řešení LR pro konkrétní realizaci Langevinovy síly jako náhodného procesu

provedeme pro

1D Brownovu částici

lineární oscilátor
„pérové váhy“

simulace Kapplerových dat

Langevinova rovnice I.

Původně použita na volnou Brownovu částici.

Významné pokroky v pochopení.

Difusní řešení je správné v limitě dlouhých časů.

Pro krátké časy se projeví inerciální efekty

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

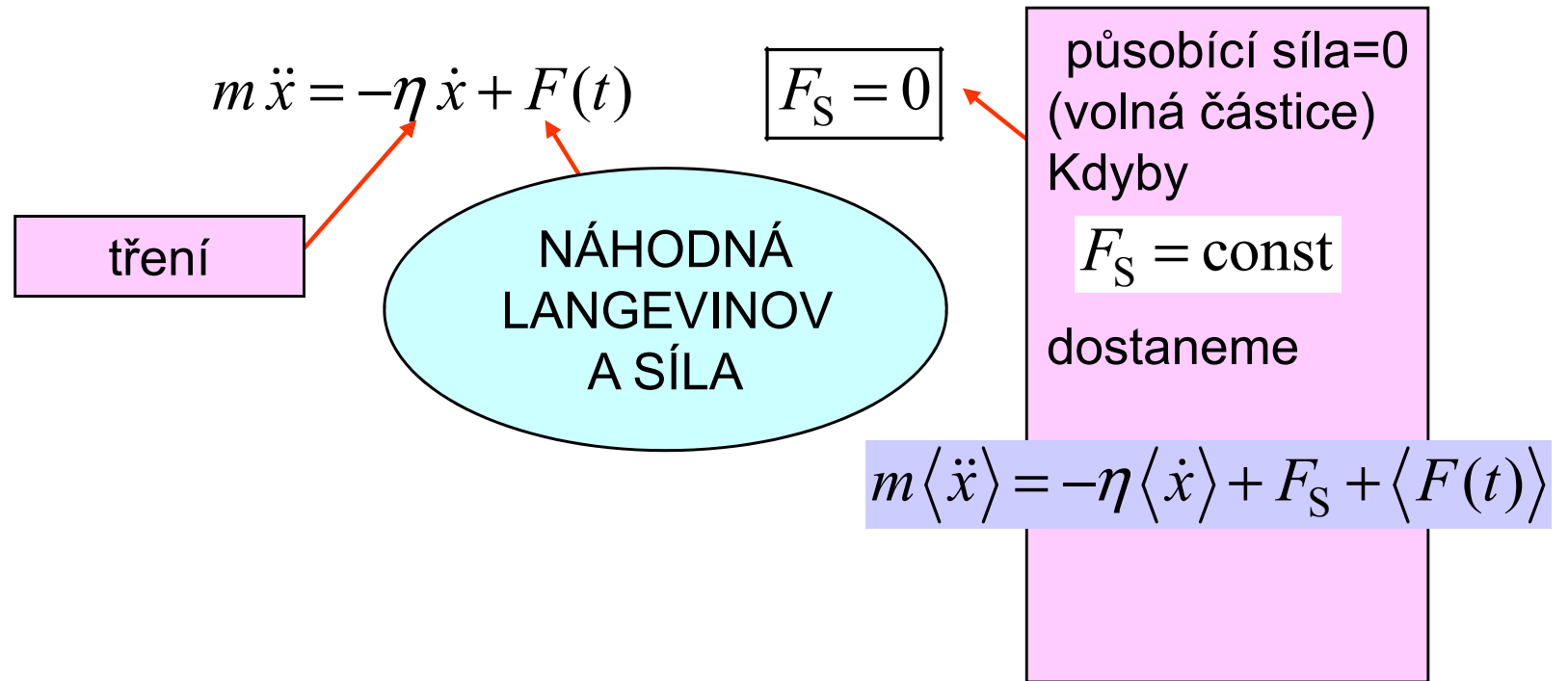
$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F(t)$$

$$F_S = 0$$

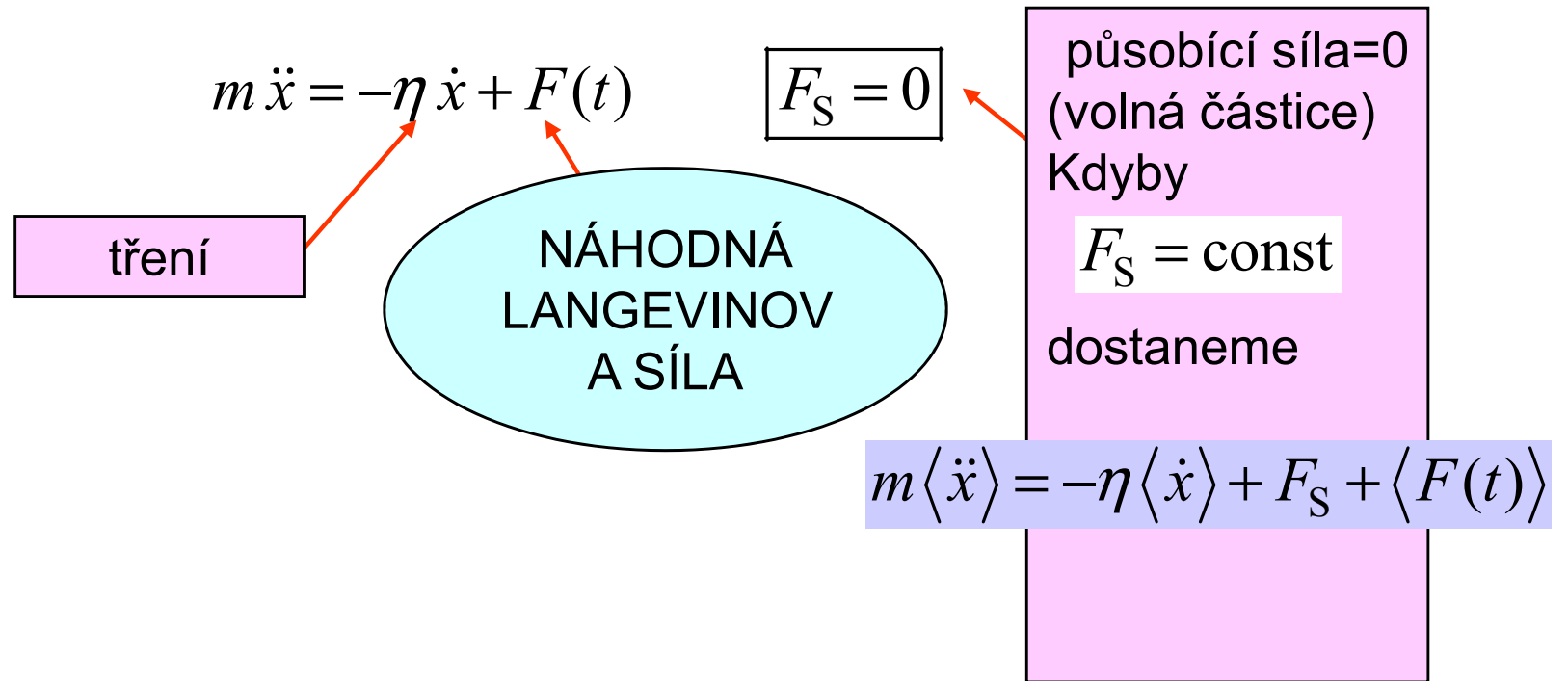
tření

NÁHODNÁ
LANGEVINOV
A SÍLA

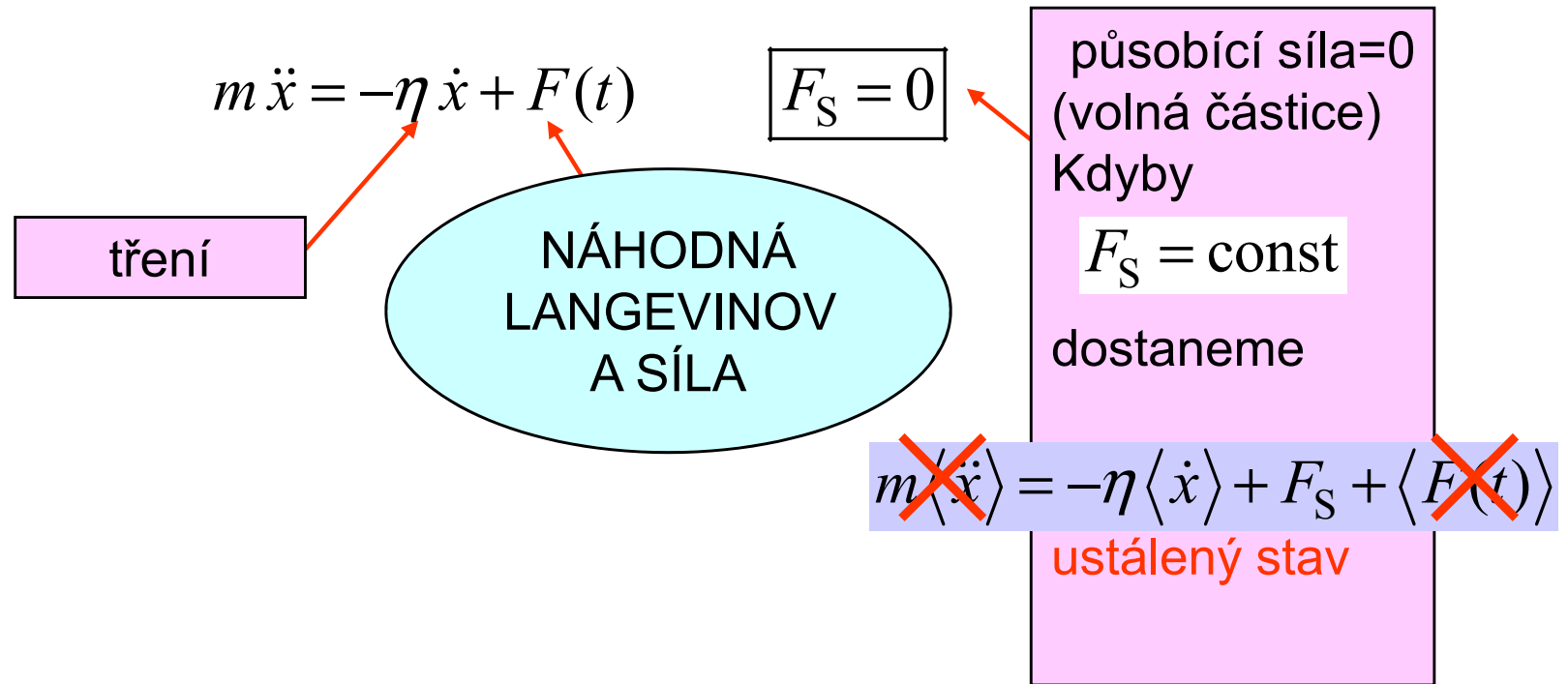
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



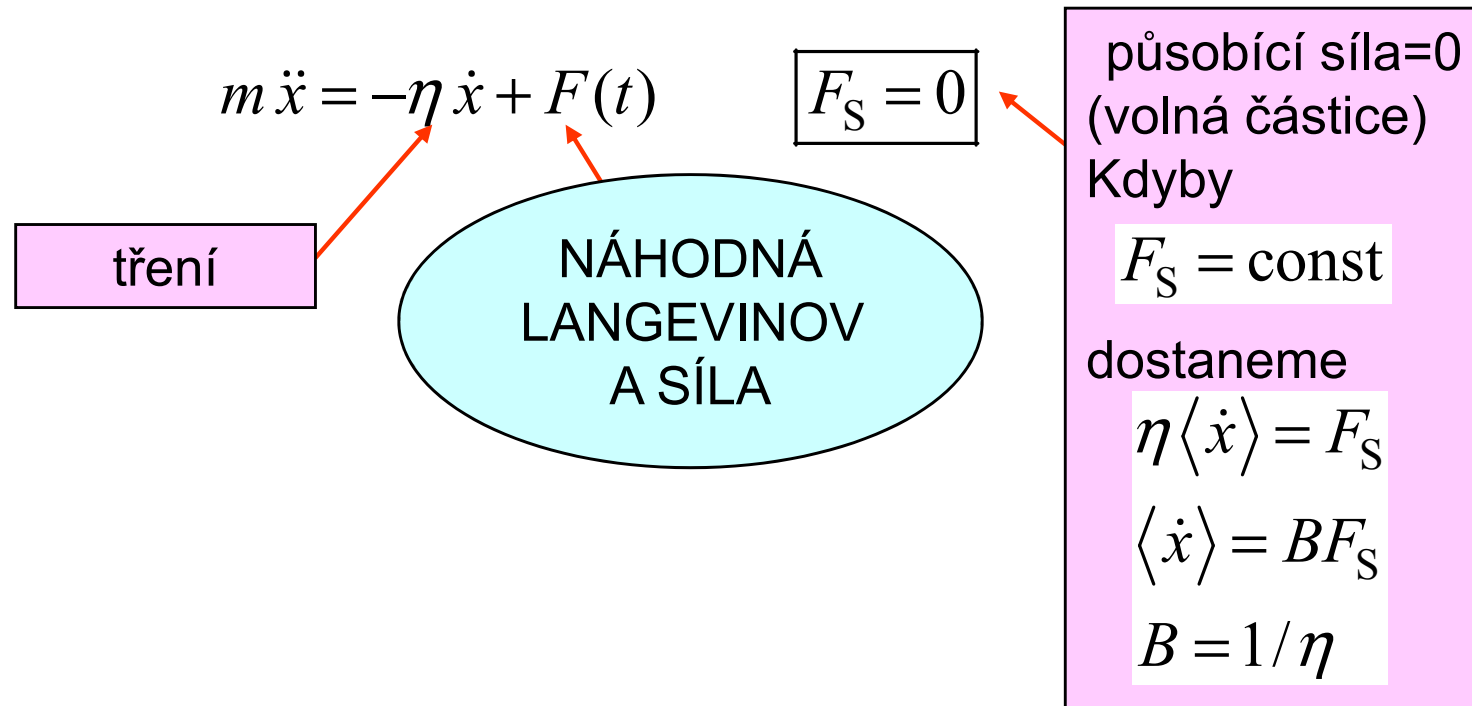
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F(t)$$

$$F_S = 0$$

tření

NÁHODNÁ
LANGEVINOV
A SÍLA

dělíme m

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

působící síla=0
(volná částice)
Kdyby

$$F_S = \text{const}$$

dostaneme

$$\eta \langle \dot{x} \rangle = F_S$$

$$\langle \dot{x} \rangle = B F_S$$

$$B = 1/\eta$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F(t)$$

$$F_S = 0$$

tření

NÁHODNÁ
LANGEVINOV
A SÍLA

dělíme m

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

❶ Středovat ... ale co

$$x\ddot{x} = (x\dot{x})' - \dot{x}\dot{x}$$

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \langle \dot{x}\dot{x} \rangle - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale co

$$x\ddot{x} = (x\dot{x})' - \dot{x}\dot{x}$$

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \langle \dot{x}\dot{x} \rangle - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale co

$$x\ddot{x} = (x\dot{x})' - \dot{x}\dot{x}$$

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \langle \dot{x}\dot{x} \rangle - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + 0$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale co

$$x\ddot{x} = (x\dot{x})' - \dot{x}\dot{x}$$

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \langle \dot{x}\dot{x} \rangle - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + 0$$

Motivace

$$\langle f(t) \rangle = 0$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \text{const} \times \delta(t-t')$$

$$\langle xf(t) \rangle \approx \langle x \rangle \langle f(t) \rangle = 0$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} = f(t)$$

Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale co

$$x\ddot{x} = (x\dot{x})' - \dot{x}\dot{x}$$

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \langle \dot{x}\dot{x} \rangle - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + \langle xf(t) \rangle$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému
- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle x\dot{x} \rangle' = \frac{k_B T}{m} - \gamma \langle x\dot{x} \rangle + 0$$

- 4 Obecné řešení LODR 1. řádu partikulární řešení + obecné řešení homogenní rovnice

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} + C e^{-\gamma t}$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

Pokračování

- ④ Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle x\dot{x} \rangle + \gamma \langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m} \quad \text{neznámá ... } \langle x\dot{x} \rangle$$

- ④ Obecné řešení LODR 1. řádu partikulární řešení + obecné řešení homogenní rovnice

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} + C e^{-\gamma t}$$

- ⑤ Počáteční podmínka $x = 0$

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} (1 - e^{-\gamma t})$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

Pokračování

- ④ Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle x\dot{x} \rangle' + \gamma \langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m} \quad \text{neznámá ... } \langle x\dot{x} \rangle$$

- ④ Obecné řešení LODR 1. řádu partikulární řešení + obecné řešení homogenní rovnice

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} + C e^{-\gamma t}$$

- ⑤ Počáteční podmínka $x = 0$

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \quad \langle x\dot{x} \rangle = \frac{1}{2} \langle \dot{x}^2 \rangle$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

Pokračování

- 4 Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle x\dot{x} \rangle + \gamma \langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m} \quad \text{neznámá ... } \langle x\dot{x} \rangle$$

- 4 Obecné řešení LODR 1. řádu partikulární řešení + obecné řešení homogenní rovnice

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} + C e^{-\gamma t}$$

- 5 Počáteční podmínka $x = 0$

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{k_B T}{m\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \quad \langle x\dot{x} \rangle = \frac{1}{2} \langle \dot{x}^2 \rangle$$

- 6 Poslední integrace

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right)$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right)$$

VÝSLEDEK

♣ Pro $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &\rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} \right) \\ &\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t \end{aligned}$$

\Rightarrow identifikace $\frac{k_B T}{m\gamma} \equiv D$ $\boxed{k_B T \cdot B = D}$ EINSTEINŮV VZTAH

♣ Pro $t \rightarrow 0$

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - 1 + \gamma t - \frac{1}{2} \gamma^2 t^2 + \dots) \right) \approx \langle (\dot{x}t)^2 \rangle$$

BALISTICKÝ ROZLET

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right)$$

VÝSLEDEK

♣ Pro $t \rightarrow \infty$ $t \gg \tau$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &\rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} \right) \\ &\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t \end{aligned}$$

$$e^{-\gamma t} \equiv e^{-t/\tau}$$

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau \quad \text{relaxační doba}$$

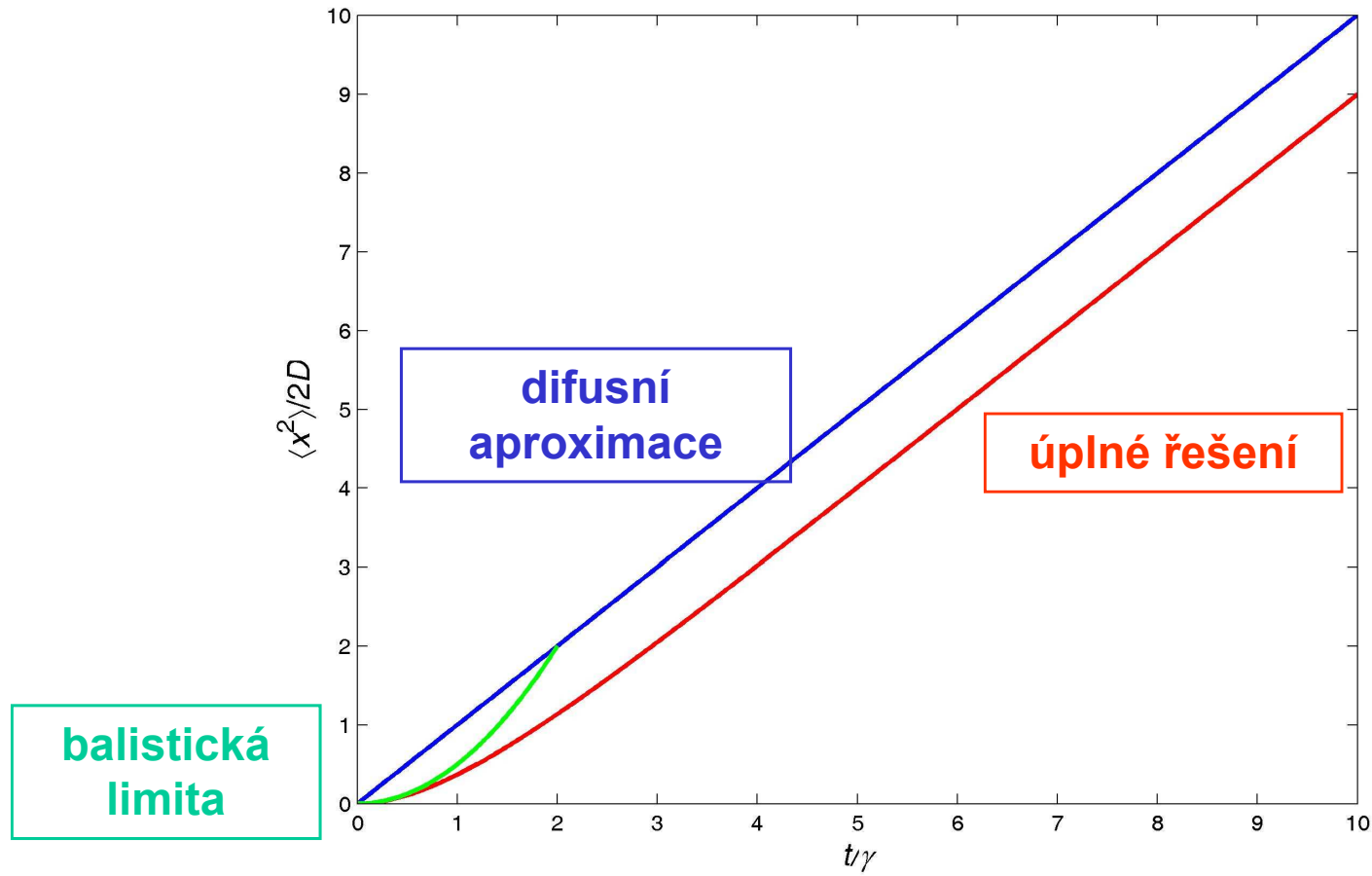
\Rightarrow identifikace $\frac{k_B T}{m\gamma} \equiv D$ $k_B T \cdot B = D$ EINSTEINŮV VZTAH

♣ Pro $t \rightarrow 0$ $t \ll \tau$

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - 1 + \gamma t - \frac{1}{2} \gamma^2 t^2 + \dots) \right) \approx \langle (\dot{x}t)^2 \rangle$$

BALISTICKÝ ROZLET

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

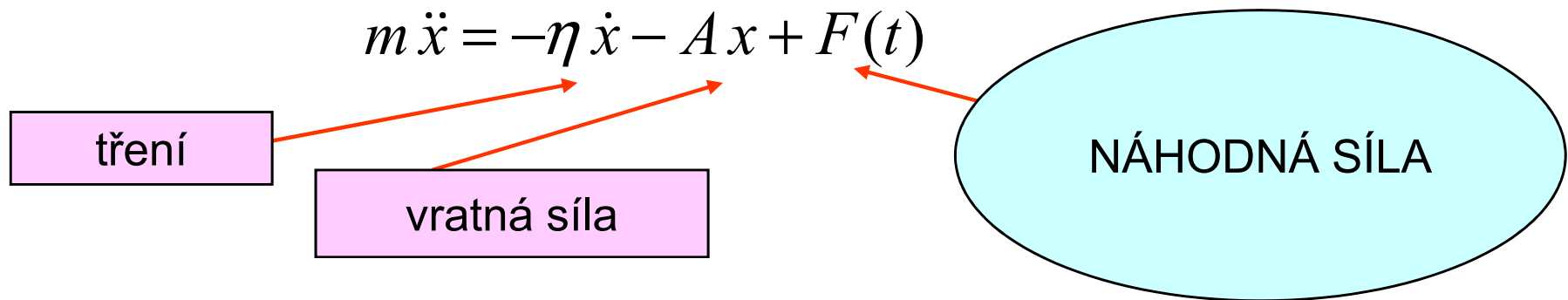


Langevinova rovnice II.

Pro lineární oscilátor je řešení pomocí středovacích procedur také možné.

My se soustředíme na přímou simulaci, abychom napodobili Kapplerovy časové průběhy.

Langevinova rovnice pro lineární oscilátor



Náhodná síla spolu s třením
odrážejí účinek termostatu na systém

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f(t)$$

tlumený lineární oscilátor
parametry empiricky dostupné

hnán vtištěnou silou
síla náhodná, Gaussovský bílý šum

středování $\langle \ddot{x} \rangle + \gamma \langle \dot{x} \rangle + \omega_0^2 \langle x \rangle = \langle f(t) \rangle$

$$\langle \dot{x} \rangle = \langle x \rangle^{\square}, \quad \langle \ddot{x} \rangle = \langle x \rangle^{\square\square}$$

$$\langle x \rangle^{\square\square} + \gamma \langle x \rangle^{\square} + \omega_0^2 \langle x \rangle = 0$$

středovaný pohyb
je za chvíli utlumen

Langevinova rovnice pro lineární oscilátor – řešení

LODR 2. řádu s pravou stranou

obecné řešení = obecné ř. homog. rovnice +
partikulární řešení nehomog. rovnice

$$x(t) = C_1 \cdot \exp(-\lambda_1 t) + C_2 \cdot \exp(-\lambda_2 t) + \tilde{x}(t)$$

sekulární rovnice $\lambda^2 - \gamma \cdot \lambda + \omega_0^2 = 0$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \gamma \pm \sqrt{\frac{1}{4} \gamma^2 - \omega_0^2}$$

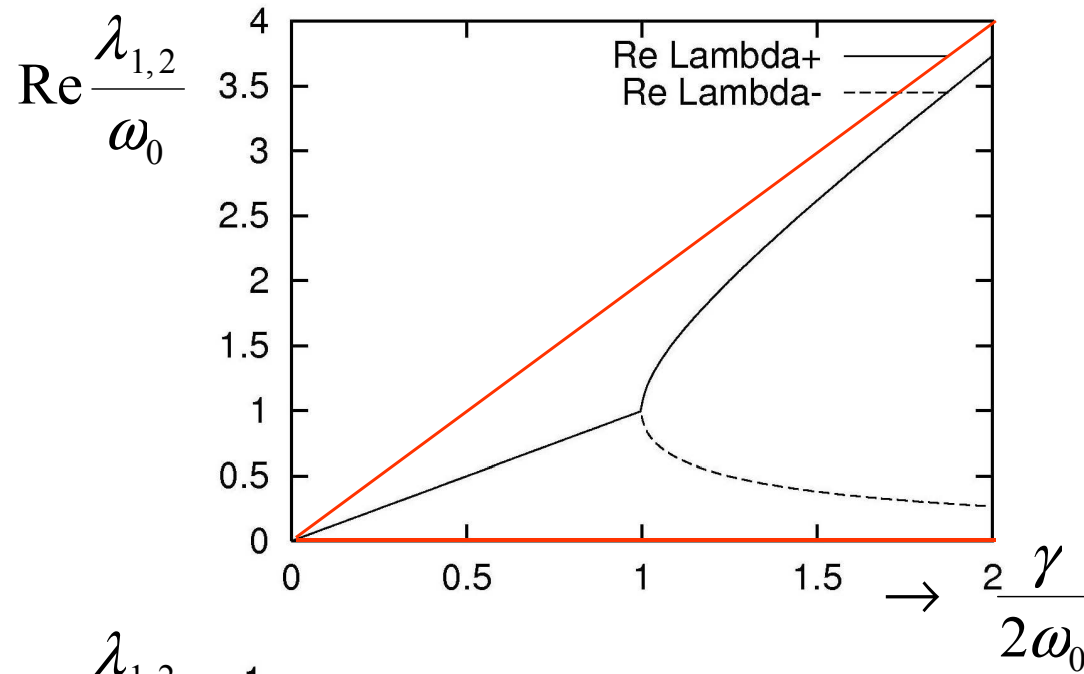
kritická hodnota

podtlumené kmity

$$\frac{1}{2} \gamma = \omega_0$$

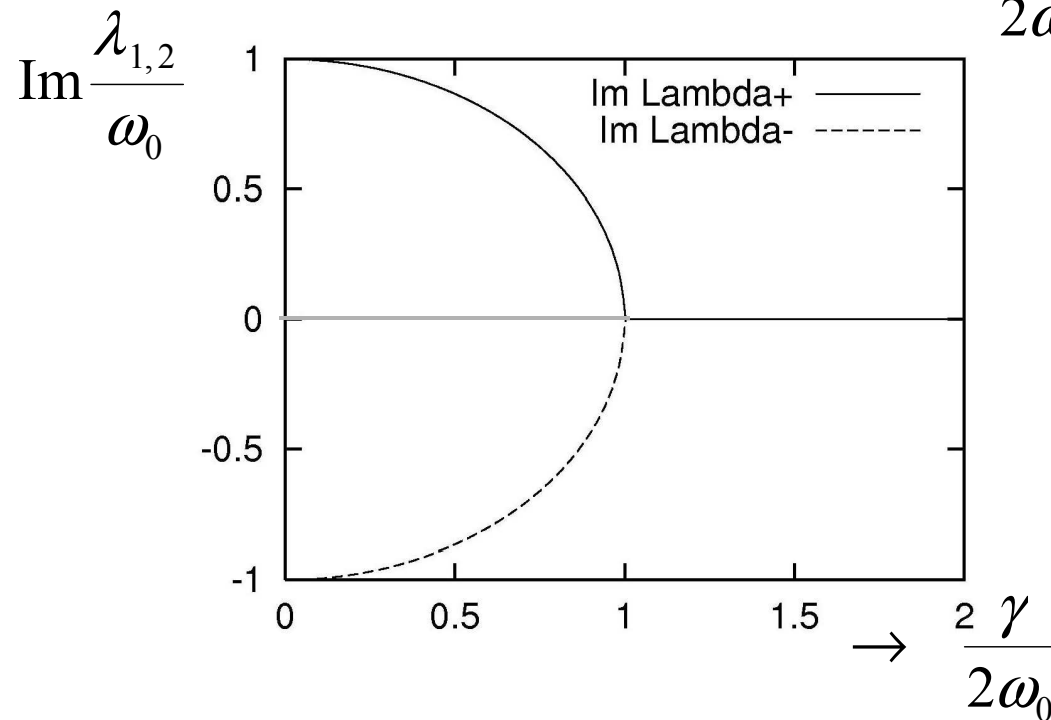
přetlumené kmity

Kořeny charakteristické rovnice



asymptoty

bezrozměrný parametr

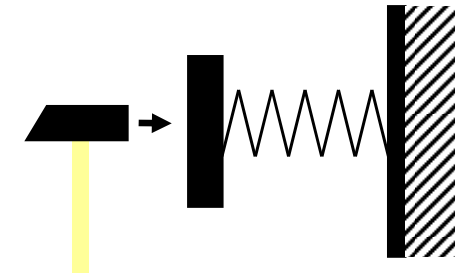


Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$



pulsní excitace

Langevinova rovnice – Greenova funkce

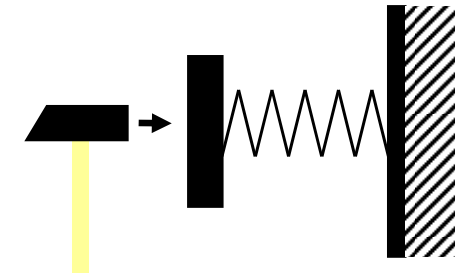
partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

PAK

$$\tilde{x}(t) = \int dt' \cdot G(t, t') \times f(t')$$



pulsní excitace

Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

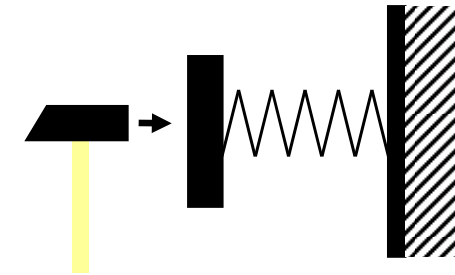
$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

PAK

$$\tilde{x}(t) = \int dt' \cdot G(t, t') \times f(t')$$

Ověření: $LG = \delta$

Proto $L\tilde{x} = \int dt' LGf = \int dt' \delta \times f = f$



pulsní excitace

Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

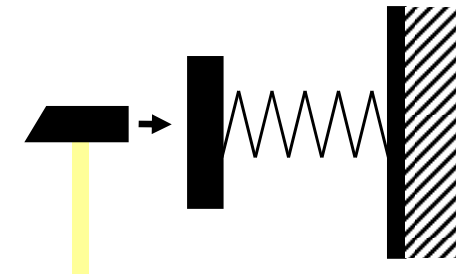
$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

PAK

$$\tilde{x}(t) = \int dt' \cdot G(t, t') \times f(t')$$

Ověření: $LG = \delta$

Proto $L\tilde{x} = \int dt' LGf = \int dt' \delta \times f = f$



akustická
měření
Greenovy
funkce
podle
definice
s kladívkem

Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

A $G(t, t') = 0$ pro $t < t'$

kausalita

B $\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = 0$ pro $t > t'$

C $\frac{d}{dt} G(t = t' + 0) = 1$ $G(t = t' + 0) = 0$

okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

dostaneme integraci po malém okolí bodu $t = t'$

Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

A $G(t, t') = 0$ pro $t < t'$ kausality

B $\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = 0$ pro $t > t'$

C $\frac{d}{dt} G(t = t' + 0) = 1$ $G(t = t' + 0) = 0$


okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

dostaneme integraci po malém okolí bodu $t = t'$

$$G(\tau) = -\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} (\exp(-\lambda_1 \tau) - \exp(-\lambda_2 \tau)) \cdot \vartheta(\tau)$$

$$\tau \leftarrow t - t'$$

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly  $\langle f(t)f(t') \rangle = 2D\delta(t-t')$

konvenční, ale matoucí
označení

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly

● $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

naše konvenční označení


Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly

● $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

???

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly  $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

Musíme se opřít o ekvipartiční
teorém

???

$$\begin{aligned}\langle x^2(t) \rangle &= \left\langle \iint dt' dt'' G(t-t')G(t-t'')f(t')f(t'') \right\rangle = \\ &= 2\Gamma \int dt' G^2(t-t') = \frac{\Gamma}{\gamma} \cdot \frac{1}{\omega_0^2} \quad \text{přímý výpočet}\end{aligned}$$

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

Musíme se opřít o ekvipartiční
teorém

???

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \iint dt' dt'' G(t-t') G(t-t'') f(t') f(t'') \right\rangle =$$

$$= 2K \int dt' G^2(t-t') = \frac{K}{\gamma} \cdot \frac{1}{\omega_0^2}$$

$$= \frac{k_B T}{m\omega_0^2}$$

$$\frac{1}{2} m\omega_0^2 \langle x^2(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} k_B T$$

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

Musíme se opřít o ekvipartiční
teorém

???

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \iint dt' dt'' G(t-t') G(t-t'') f(t') f(t'') \right\rangle =$$

$$= 2K \int dt' G^2(t-t') = \frac{K}{\gamma} \cdot \frac{1}{\omega_0^2}$$

$$= \frac{k_B T}{m\omega_0^2}$$

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 \langle x^2(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} k_B T$$

Výsledek

(připomíná
Einsteinův vztah)

$$\frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\Gamma\delta(t-t')$

Musíme se opřít o ekvipartiční teorem

???

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \iint dt' dt'' G(t-t')G(t-t'') f(t')f(t'') \right\rangle =$$

$$= 2K \int dt' G^2(t-t') = \frac{K}{\gamma} \cdot \frac{1}{\omega_0^2}$$

$$= \frac{k_B T}{m\omega_0^2}$$

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 \langle x^2(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2} k_B T$$

Výsledek

(připomíná
Einsteinův vztah)

$$\frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

stejný jako pro volnou
Brownovu částici

Numerická integrace

$$\tilde{x}(t) = \int dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t')$$

$$\approx \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t')$$

$$\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n$$

Numerická integrace

$$\tilde{x}(t) = \int dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t')$$

rovnoměrné dělení intervalu času

$$\approx \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t')$$

$$\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n$$

Numerická integrace

$$\tilde{x}(t) = \int dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t')$$

rovnoměrné dělení intervalu času

$$\approx \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t')$$

aproximace – věta o stř. hodnotě
(Greenova funkce je plavná)

$$\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n$$

Numerická integrace

$$\tilde{x}(t) = \int dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t')$$

rovnoměrné dělení intervalu času

$$\approx \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t')$$

aproximace – věta o stř. hodnotě
(Greenova funkce je plavná)

$$\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n$$

diskretizovaný tvar vhodný pro
výpočet ... *rychlejší přímé num.
řešení diferenciální rovnice*

Numerická integrace

$$\begin{aligned}\tilde{x}(t) &= \int dt' G(t-t') f(t') \\ &= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t') \\ &\square \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t') \\ &\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n\end{aligned}$$

diskrétní Gaussův
náhodný proces

$$\begin{aligned}\langle \tilde{f}^2 \rangle &= \left\langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \right\rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2K \delta(t'-t'') = 2K \Delta t\end{aligned}$$

Numerická integrace

$$\begin{aligned}
 \tilde{x}(t) &= \int dt' G(t-t') f(t') \\
 &= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t') \\
 &\square \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t') \\
 &\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{f}^2 \rangle &= \langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2K \delta(t'-t'') = 2K \Delta t
 \end{aligned}$$

diskrétní Gaussův
náhodný proces

rozdělení
pravděpodobnosti

$$p(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-X^2 / 2\sigma^2\right)$$

$$\sigma = \sqrt{2K \Delta t}$$

Numerická integrace

$$\begin{aligned}
 \tilde{x}(t) &= \int dt' G(t-t') f(t') \\
 &= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t') \\
 &\square \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t') \\
 &\equiv \sum_n G(t-t_n) \check{f}_n
 \end{aligned}$$

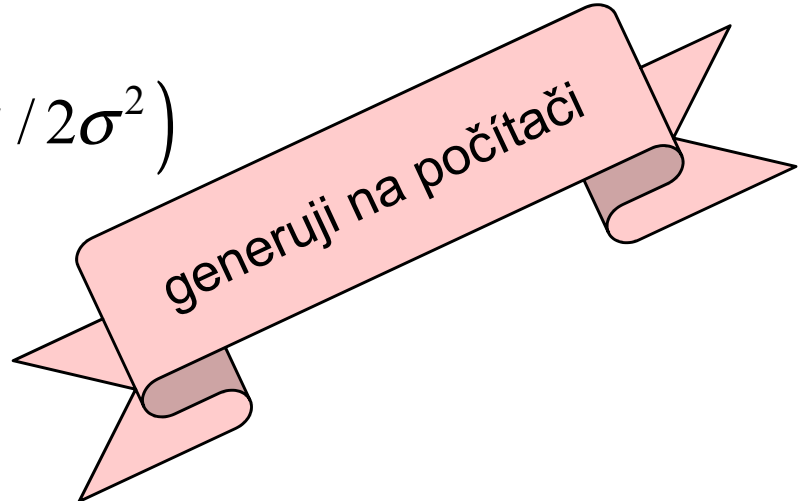
$$\begin{aligned}
 \langle \check{f}^2 \rangle &= \left\langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \right\rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2K \delta(t'-t'') = 2K \Delta t
 \end{aligned}$$

diskrétní Gaussův
náhodný proces

rozdělení
pravděpodobnosti

$$p(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-X^2 / 2\sigma^2)$$

$$\sigma = \sqrt{2D\Delta t}$$



Numerická integrace

$$\begin{aligned}\tilde{x}(t) &= \int dt' G(t-t') f(t') \\ &= \sum_n \int_{\Delta_n} dt' G(t-t') f(t') \\ &\square \sum_n G(t-t_n) \int_{\Delta_n} dt' f(t') \\ &\equiv \sum_n G(t-t_n) \tilde{f}_n\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \tilde{f}^2 \rangle &= \left\langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \right\rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2K \delta(t'-t'') = 2K \Delta t\end{aligned}$$

diskrétní Gaussův
náhodný proces

rozdělení
pravděpodobnosti

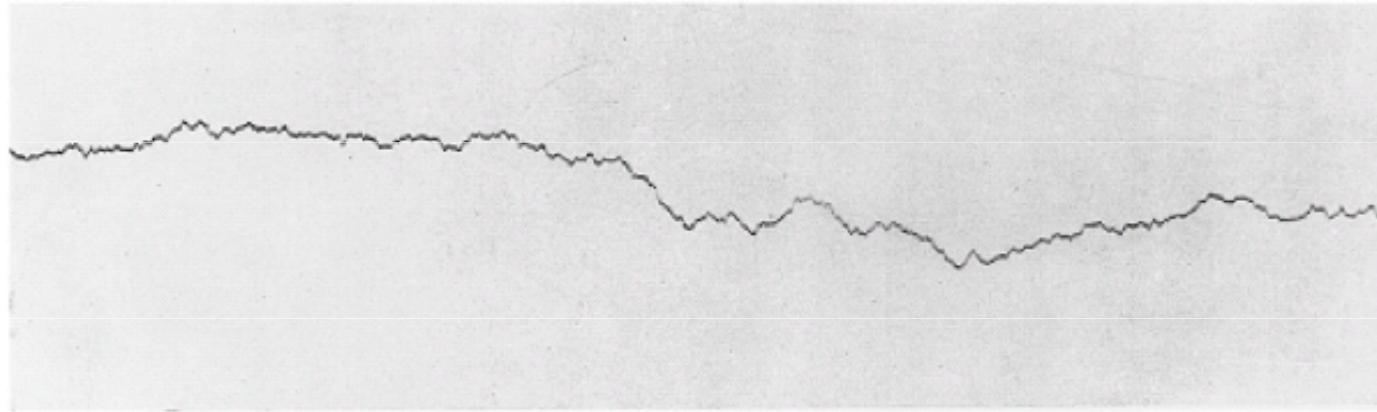
$$p(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-X^2 / 2\sigma^2)$$

$$\sigma = \sqrt{2D\Delta t}$$

generování na počítači

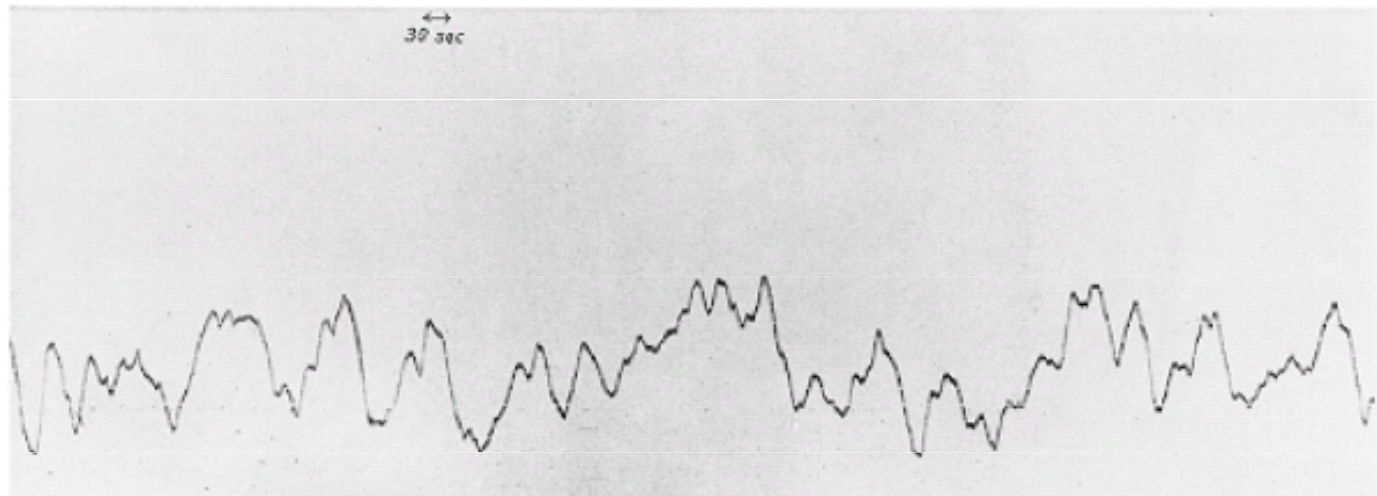
pseudonáhodná
čísla

Ukázka Kapplerových měření



Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (Methode B) (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Skalenabstand: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $dx = 2$ mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur 15° C

Fig. 4a



Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $dx = 2$ mm. b) $4 \cdot 10^{-3}$ mm Hg. Temperatur 10° C

Fig. 4b

Ukázka Kapplerových měření



vysoký tlak, přetlumený oscilátor

Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (Methode B) (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Skalenabstand: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $d x = 2$ mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur 15° C

Fig. 4a

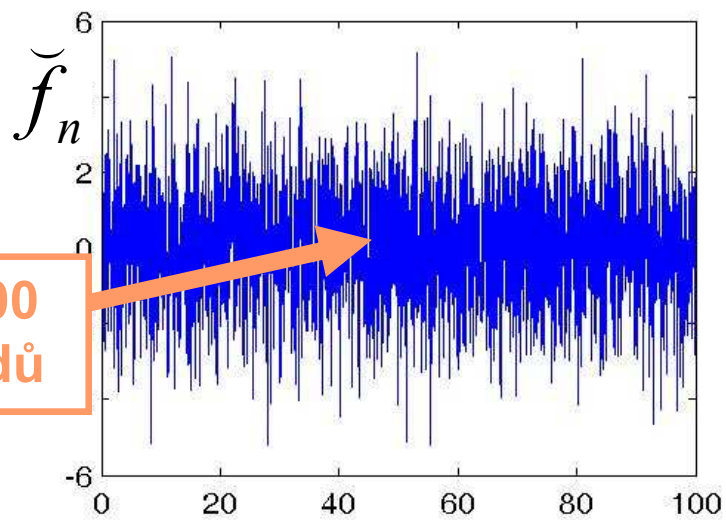
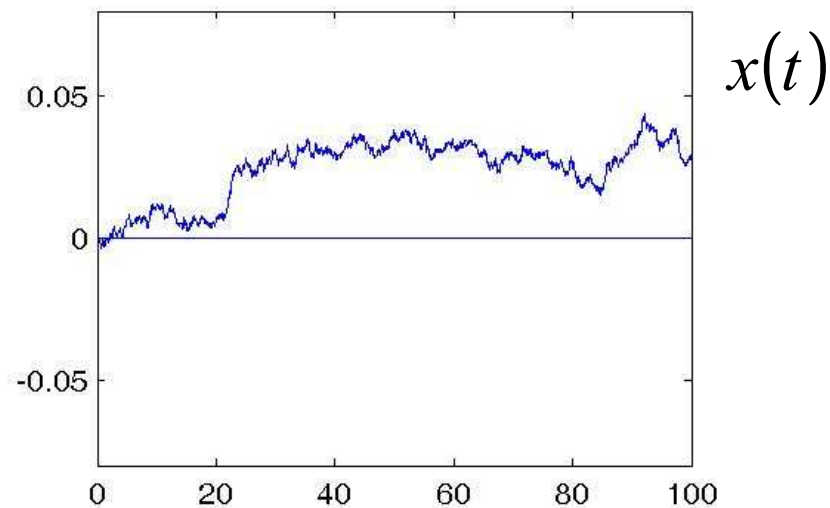
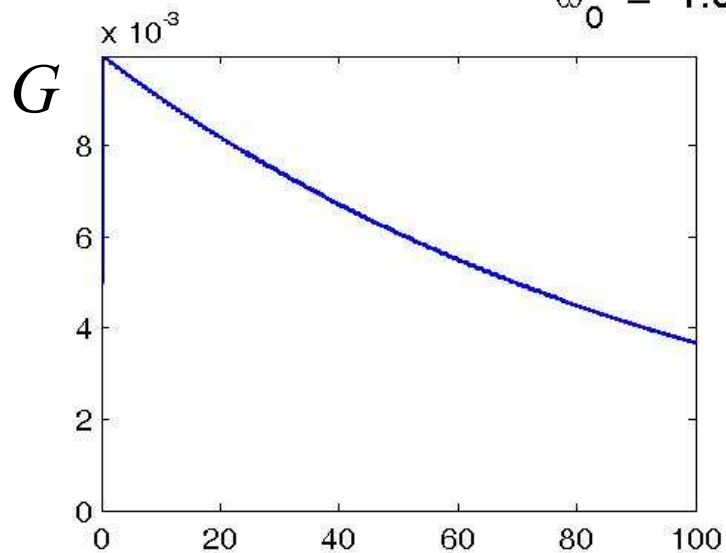


snížený tlak, podtlumený oscilátor

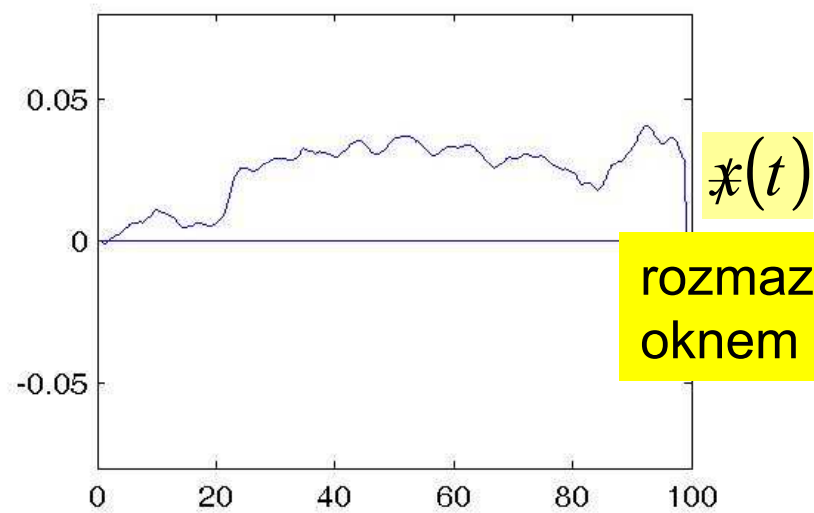
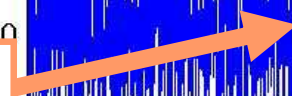
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $d x = 2$ mm. b) $4 \cdot 10^{-3}$ mm Hg. Temperatur 10° C

Fig. 4b

$$\omega_0 = 1.0, \quad \gamma = 100.$$



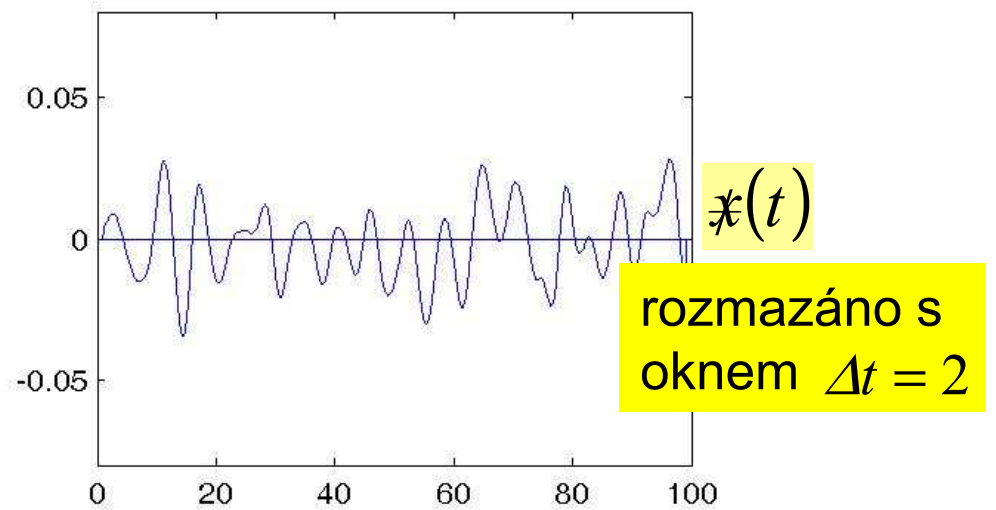
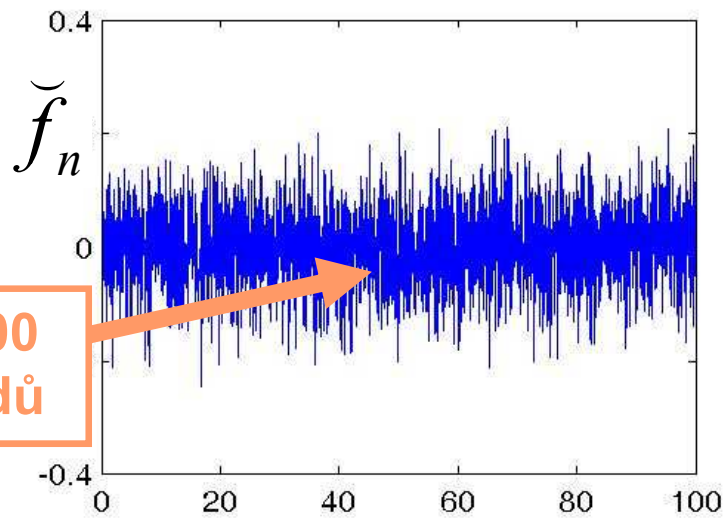
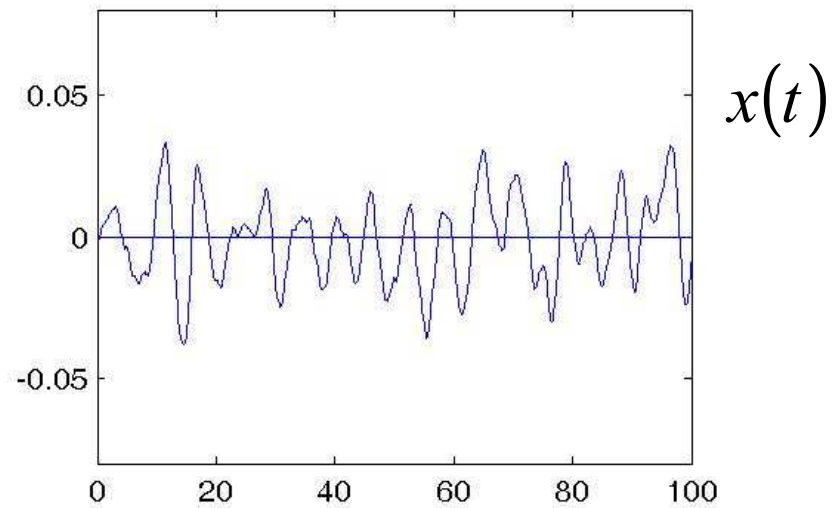
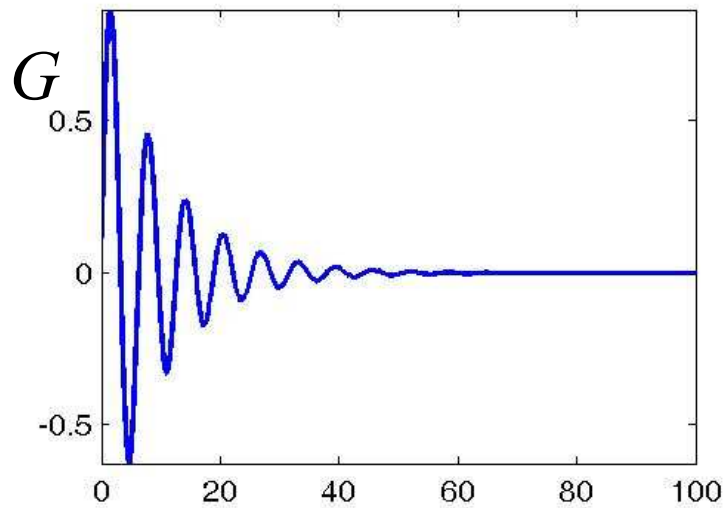
2500
bodů



rozmazáno s
oknem $\Delta t = 2$

→ čas

$$\omega_0 = 1.0, \gamma = 0.2$$



→ čas

The end

Systematický popis termických fluktuací

termické fluktuace

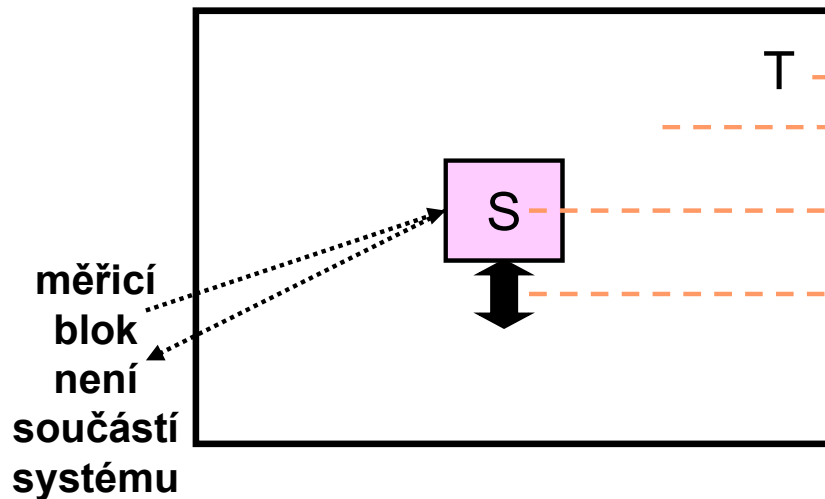
||

kvantové fluktuace

současnost

šum
noise

MAKROSKOPICKÁ APARATURA



termostat makroskopický "nekonečný" . . .
mnoho nezávislých vnitřních stupňů volnosti

system mesoskopický

interakce T -- S

$$H_{TOT} = H_T + H_S + U_{ST}$$

$$\approx \sum H_{T\alpha} + H$$

mikroskopické
stupně volnosti globální

$$H_T = \sum H_{T\alpha} + U_{TT}$$

$$H_S = H + H_{\text{vnitř}}$$

$$U_{ST} = ?$$

"silné slabé" ↔ **molekulární chaos**

Termostat z ideálního plynu

$$H_T = \sum H_{T\alpha} + U_{TT} \quad \text{obecný tvar hamiltoniánu}$$
$$= \sum \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m} + \underbrace{\sum V_{C\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U_{\alpha\beta}}_{\text{srážky vedou k chaotisaci}} \quad \text{pro (téměř) ideální plyn}$$

srážky vedou k chaotisaci

podmínky pro dobrý termostat
z ideálního plynu

$$\frac{a}{\bar{v}} \ll \frac{\ell}{\bar{v}} \ll \tau_S$$

doba chaotisace (srážková doba)

doba termatisace (relaxační doba)

charakteristická doba systému

TERMOSTAT:

definuje a fixuje teplotu

je robustní, nedá se vychýlit

je rychlý při návratu do rovnováhy

S termostatem pracujeme tak, jakoby po dobu zkoumaného procesu setrval v rovnováze



Dynamický systém v rovnováze s termostatem

Naše malé systémy si můžeme myslet jako " $N + 1$ " molekulu, trochu sice větší, ale jinak zapadající do Boltzmannovy konstrukce kinetické teorie

Předpokládáme totiž $H_{\text{TOT}} = \underbrace{\sum H_{T\alpha} + H}_{\text{"N + 1" molekul}} + U_{ST}$

Škrtnutý člen vyvolá nevratnou dynamiku. Jsou dvě cesty:

- Počítáme střední hodnoty s rozdělovací funkcí

$$f(p, q) \propto \exp(-\beta \cdot H(p, q))$$

Tímto vnucením rovnováhy jsme rovnocenně dosáhli nevratnosti.

- Začneme dynamické výpočty pro systém **S** pod dynamickým vlivem **T**. To je možné např. za použití *Langevinovy rovnice* (... Příště)



Ekvipartiční teorém

Ekvipartiční teorém

je obecně platný za následujících předpokladů:

- Systém je klasický (**fatálně důležité ... viz Planckova funkce**)
- Uvažovaný stupeň volnosti (p nebo q) vystupuje v celkovém hamiltoniánu jen jako aditivní kvadratická funkce, typicky $\frac{1}{2} Ax^2$

Pak

$$\left\langle \frac{1}{2} Ax^2 \right\rangle = \frac{\int dx \cdot \frac{1}{2} Ax^2 \cdot \exp(-\beta \cdot \frac{1}{2} Ax^2)}{\int dx \cdot \exp(-\beta \cdot \frac{1}{2} Ax^2)} = \frac{1}{2} k_B T$$

Tento výsledek pokrývá mimo jiné Kapplerovský výpočet. Na kinetické energii vůbec nezáleží, ani na rozdílném dynamickém chování pro různé podmínky (tla vzduchu v "termostatu")

