

Langevinova rovnice – vztah třecí a náhodné síly

Michala Henzlová

26. června 2012

Langevinova rovnice

Pohybová rovnice mesoskopické částice:

$$m\ddot{x} = F_S + F(t) , \quad (1)$$

$$m\ddot{x} = F_S - \eta\dot{x} + F_a(t) , \quad (2)$$

- Náhodná síla: $F_a(t)$,
- třecí síla: $-\eta\dot{x}$,
- působící síla: F_S .

Integrální tvar rovnice

- Časový interval τ mikroskopicky velmi velký, makroskopicky velmi malý

$$\tau \gg \tau^* , \quad (3)$$

kde τ^* je korelační doba (řádově jako hlavní perioda fluktuací síly $F(t)$),

- předp.: vnější síla F_S ...pomalu se měnící funkce.

Integrace přes časový interval τ a středování

$$m \langle \dot{x}(t + \tau) - \dot{x}(t) \rangle = F_S \tau + \int_t^{t+\tau} \langle F(t') \rangle dt' , \quad (4)$$

Odvození

- Teplota termostatu $T = (k\beta)^{-1}$ – konstantní,
- označíme r možné stavy pro určitou hodnotu rychlosti v ,
- stav r – hodnota síly F označena F_r .

Reif F.: *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1965.

- První aproximace – systém spojený s částicí je v rovnováze

$$\langle F \rangle = 0 , \quad (5)$$

pravděpodobnost stavu r je $W_r^{(0)}$,

- další aproximace – popsat jak je ovlivněna $\langle F \rangle$ pohybem částice

Odvození

Počet stavů systému B (termostat) odpovídající energii E' – $\Omega(E')$. Předp. časový interval τ' , kde $\tau' > \tau^*$, po tomto časovém intervalu se změní:

$$\begin{aligned}t &\rightarrow t + \tau' , \\v &\rightarrow v + \Delta v(\tau') , \\E' &\rightarrow E' + \Delta E'(\tau') , \\ \Omega(E') &\rightarrow \Omega(E' + \Delta E'(\tau')) .\end{aligned}$$

Odvození

V rovnováze pravděpodobnost určitého stavu r úměrná počtu stavů systému B (termostat). Pro určitý stav r :

$$\frac{W_r(t + \tau')}{W_r^{(0)}} = \frac{\Omega(E' + \Delta E')}{\Omega(E')} = \exp(\beta \Delta E'), \quad (6)$$

kde $\beta = (\partial \ln \Omega / \partial E')$ – teplotní parametr termostatu.

$$W_r(t + \tau') = W_r^{(0)} \exp(\beta \Delta E') \approx W_r^{(0)} (1 + \beta \Delta E'). \quad (7)$$

Odvození

$$\langle F \rangle = \langle (1 + \beta \Delta E') F \rangle_0, \quad (8)$$

$$\langle F \rangle = \beta \langle \Delta E' F \rangle_0. \quad (9)$$

Změna energie B v čase $\tau = t' - t$: záporná práce síly F na částici

$$\Delta E' = -v(t) \int_t^{t'} F(t^*) dt^* \quad (10)$$

Odvození

Označíme $s = t^* - t'$

$$m \langle \dot{x}(t + \tau) - \dot{x}(t) \rangle = F_S \tau - \beta \bar{v}(t) \int_t^{t+\tau} dt' \int_{t-t'}^0 ds \langle F(t') F(t' + s) \rangle .$$

Děkuji za pozornost.