

F4110
Kvantová fyzika atomárních soustav
letní semestr 2012 - 2013

III.
Tepelné fluktuace: lineární oscilátor

KOTLÁŘSKÁ 6. BŘEZNA 2013

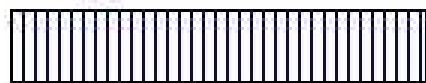
Úvodem

- 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

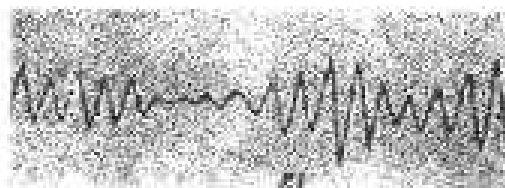
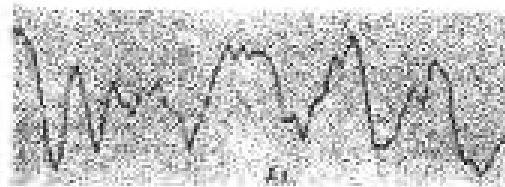
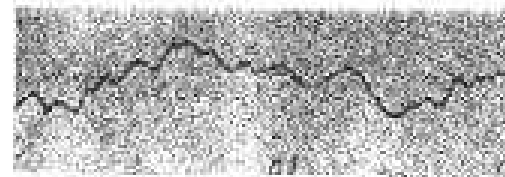
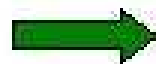
Poslední folie před týdnem – Kapplerův pokus

1931 Kappler

torzní
zrcátko



stínítko



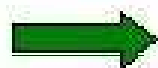
atmosférický tlak

tlak klesá

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

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

$$R = k_B N_A$$

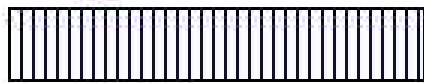


$$N_A = 6.057 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

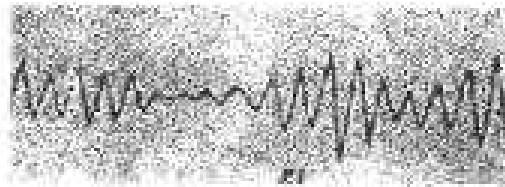
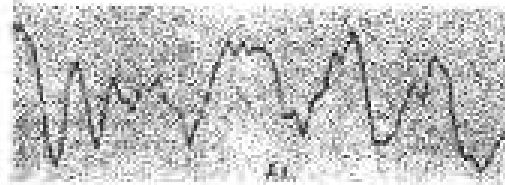
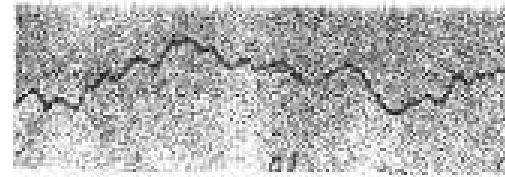
Poslední folie před týdnem – Kapplerův pokus

1931 Kappler

torzní
zrcátko



stínítko



atmosférický tlak

tlak klesá

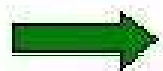
pot. energie

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

**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 minulé 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 minulé přednášky

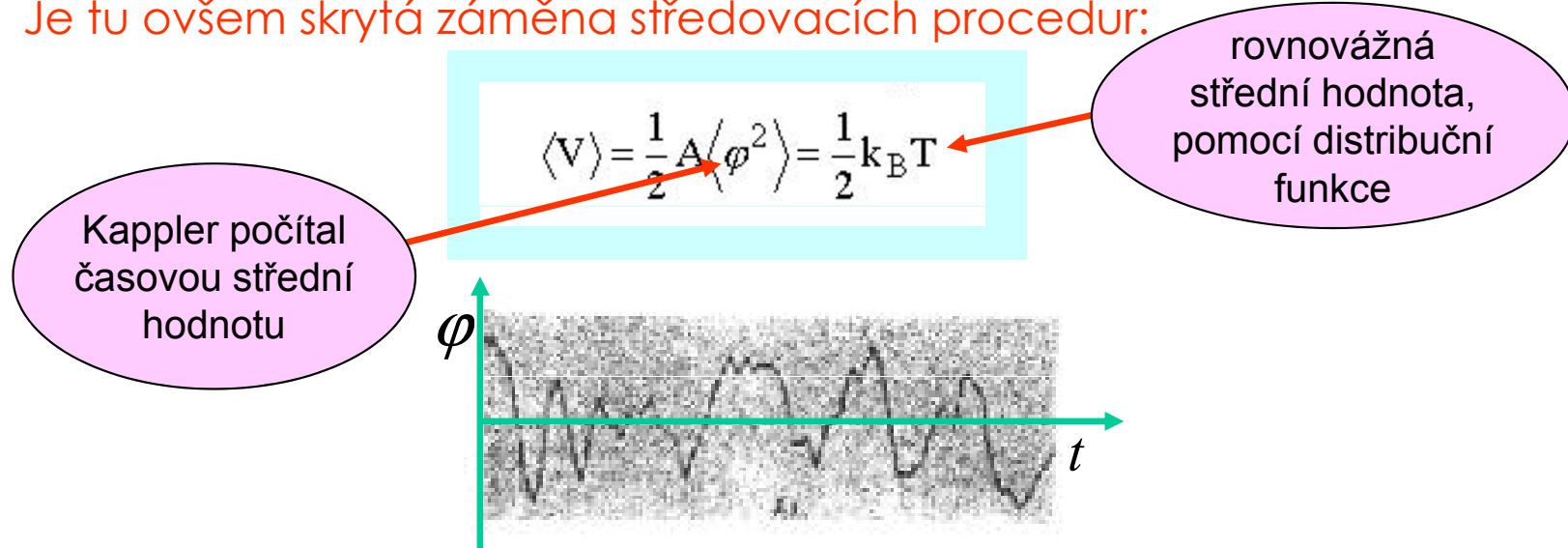
1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti 
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) 
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

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

rovnovážná
střední hodnota,
pomocí distribuční
funkce

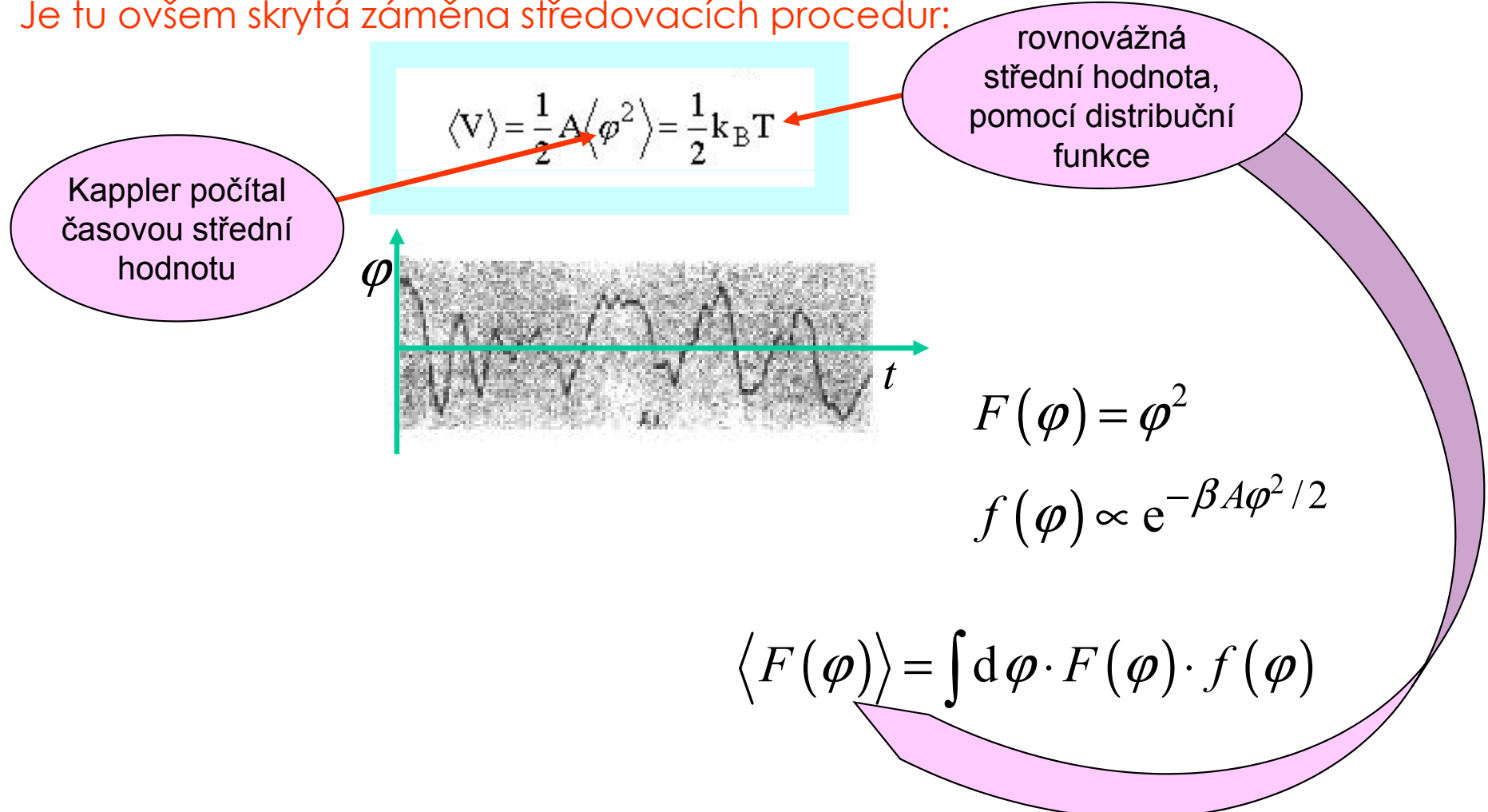
Bližší pohled na odvození z minulé přednášky

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:



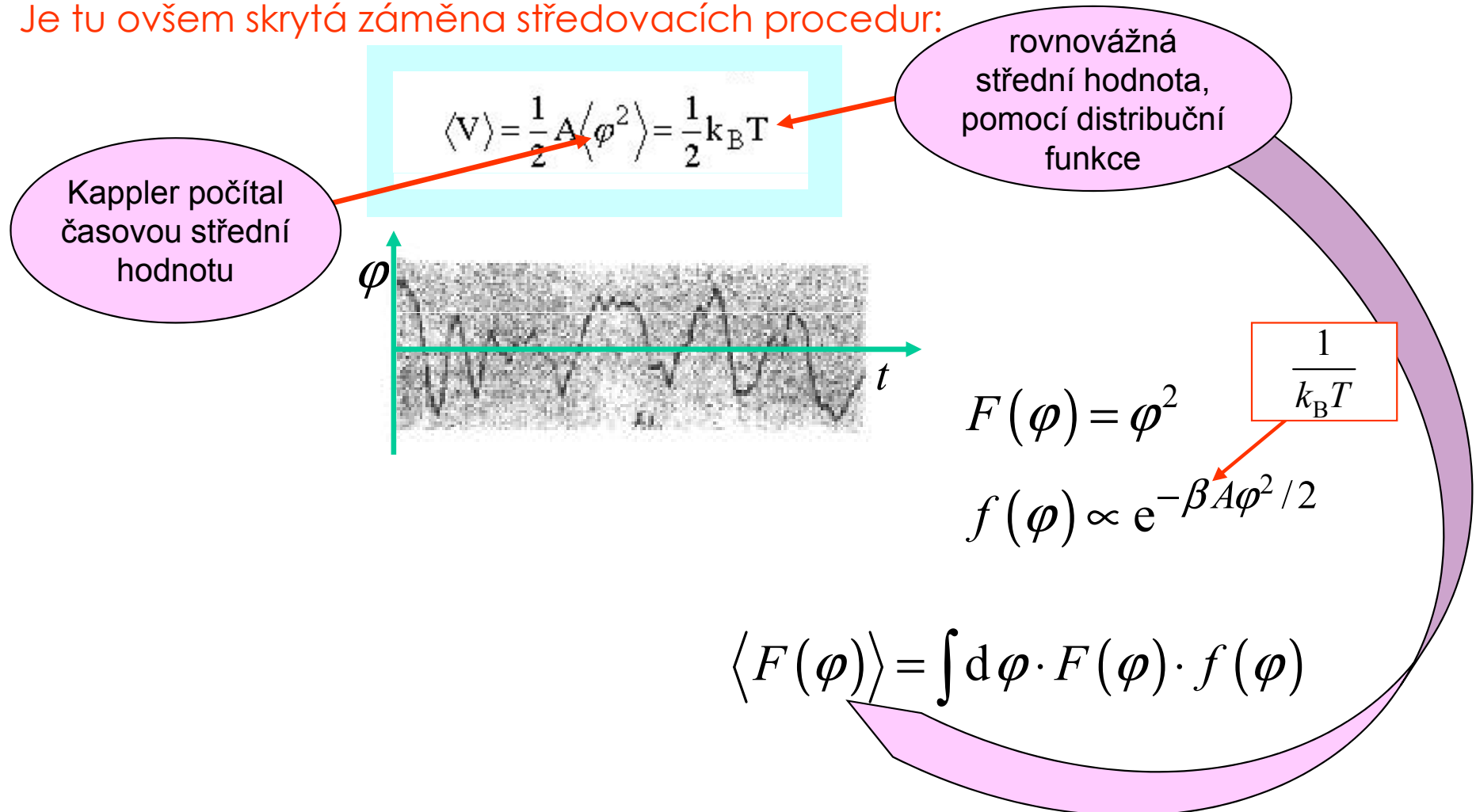
Bližší pohled na odvození z minulé přednášky

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 minulé 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 minulé přednášky

1. Zrcátko pokládáme za " $N + 1$ " molekulu, která má také své Boltzmannovo rozdělení pravděpodobnosti \bullet
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel φ) \bullet
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



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

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

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

Bližší pohled na odvození z minulé 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

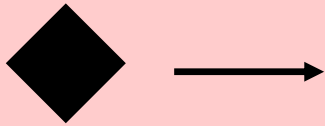
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

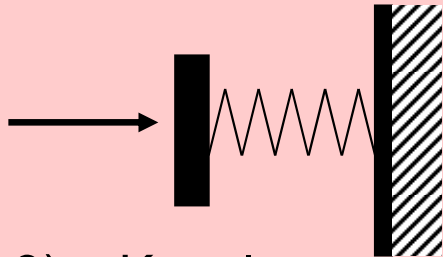
volný translační (+ volný rotační) pohyb



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

2) pérové váhy

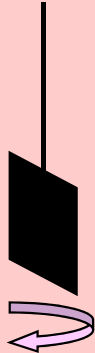
mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou



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

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

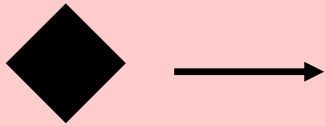
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

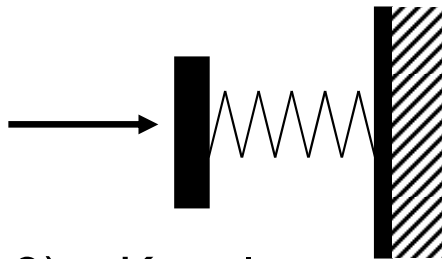
volný translační (+ volný rotační) pohyb



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

2) pérové váhy

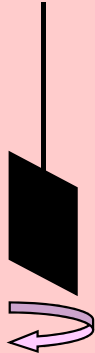
mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou



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

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

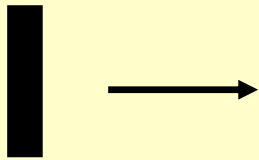
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

1) Brownova částice

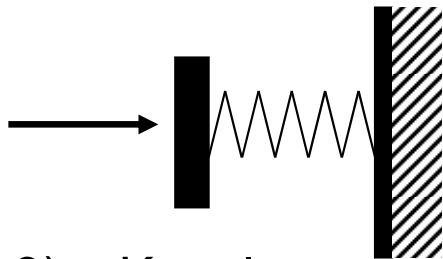
volný translační pohyb v jedné dimenzi



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

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

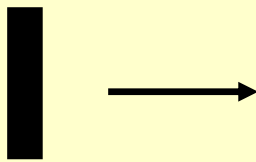
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV

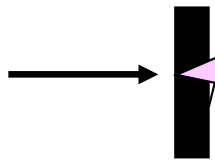
1) Brownova částice

volný translační pohyb v jedné dimenzi



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

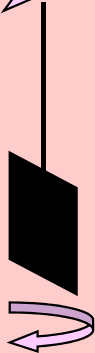
2) pérové váhy



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

3) Kapplověvo zrcátko

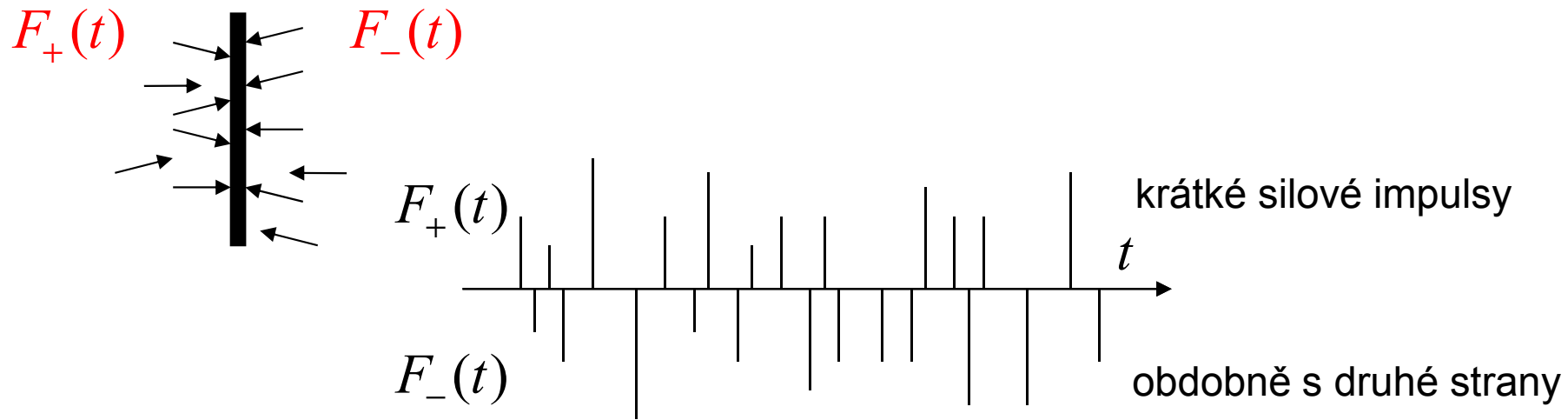
těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou



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

NÁHODNÉ SÍLY

Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu



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

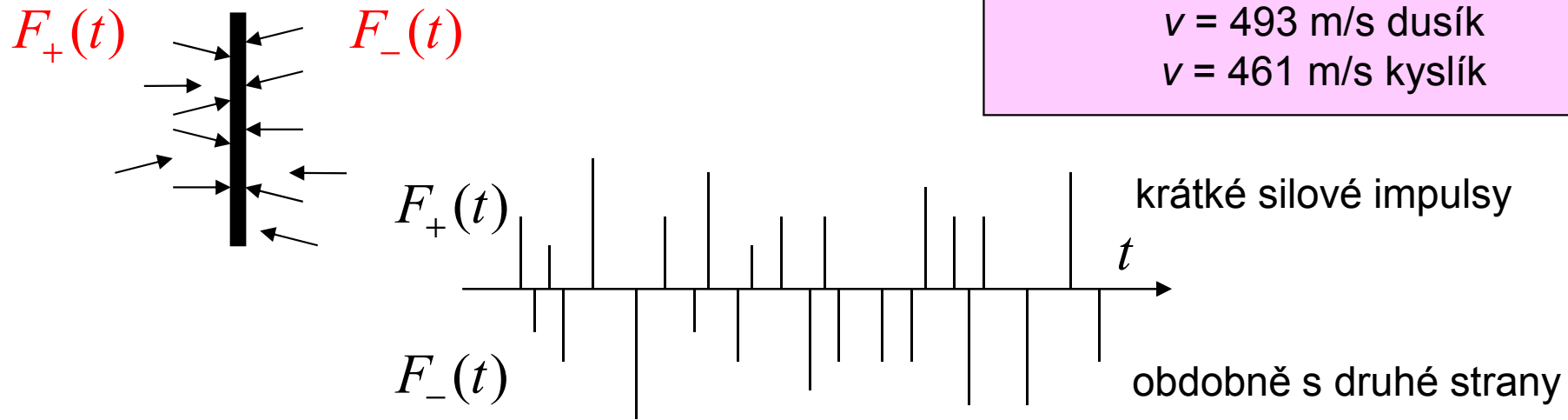
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

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

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 $F_+(t) - F_-(t)$

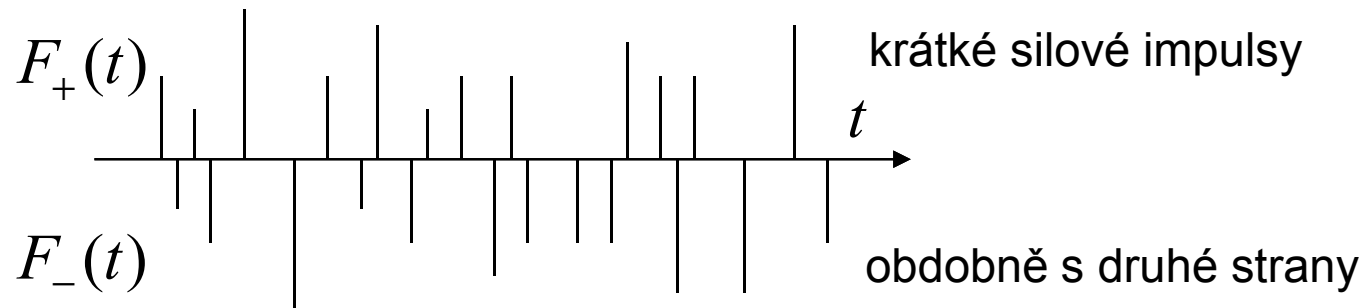
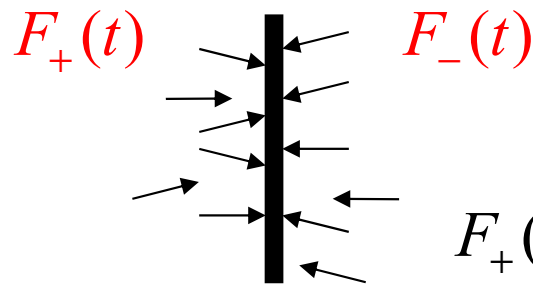
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

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

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

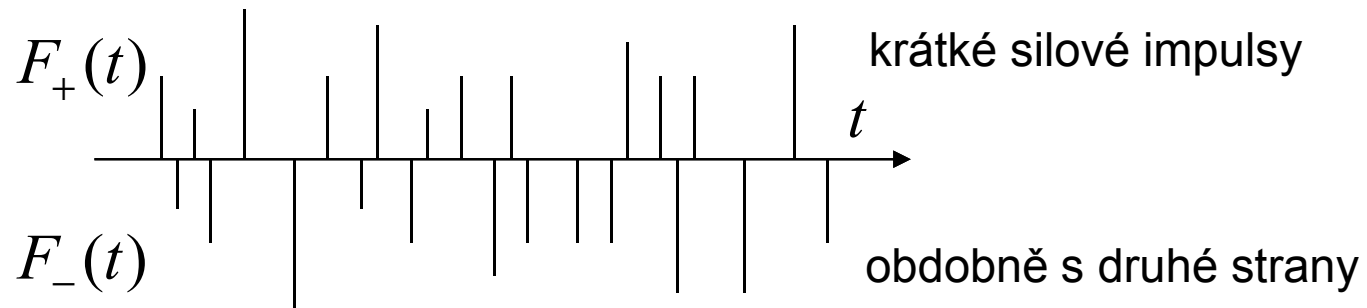
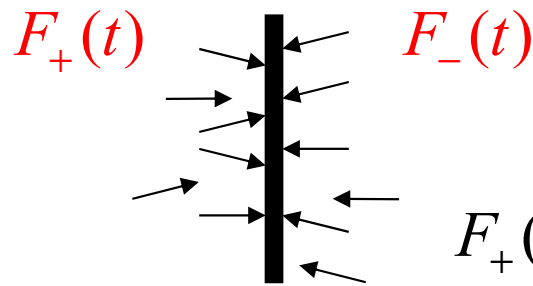
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

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

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

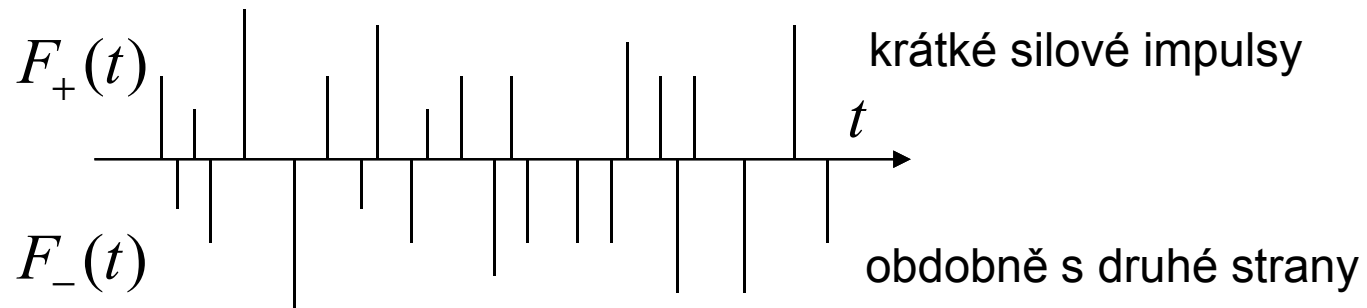
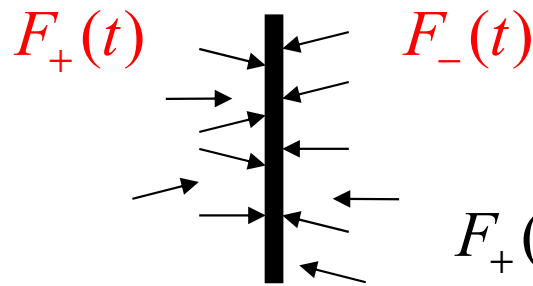
Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

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

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 $F_+(t) - F_-(t)$ ~ 10^{16} nárazů/ μ s

Impuls síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

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

KONTROLA

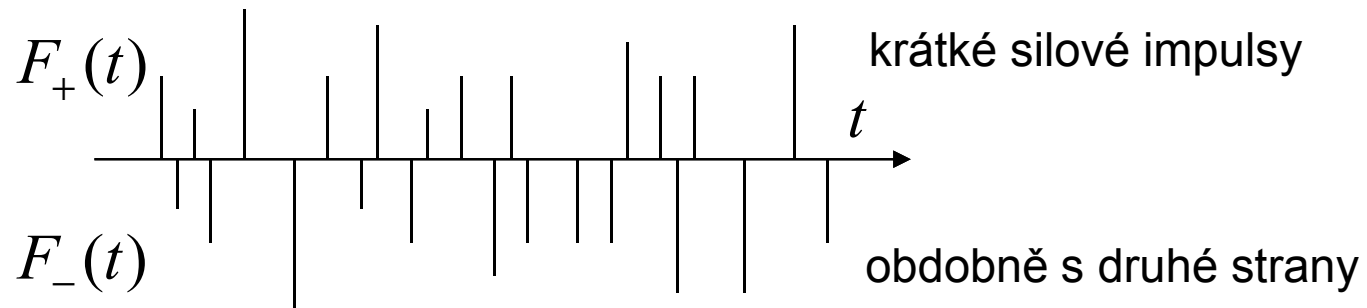
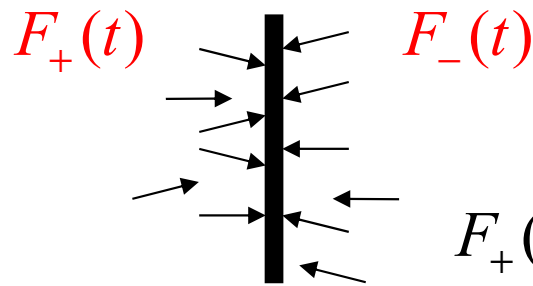
Elementární odvození stavové rovnice ideálního plynu

$$\underline{p = n \cdot \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle = n \cdot \frac{2}{3} \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = n \cdot \frac{2}{3} \frac{3}{2} k_B T = n \cdot k_B T}$$

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

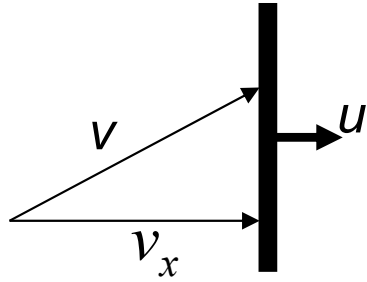
$$\int_t^{t+\tau} d\bar{t} \cdot F_+(\bar{t}) \approx \sum \tau \cdot v_x \cdot 2m v_x \cdot \vartheta(v_x) \xrightarrow{\langle \rangle} \tau \cdot n \cdot \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle \cdot S \equiv \tau \cdot p \cdot S$$

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 $u \ll \bar{v}$



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

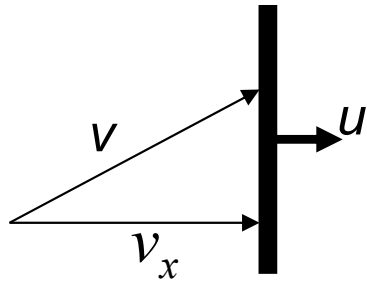
$$n \cdot m \left\langle (v_x - u)^2 \vartheta(v_x - u) \right\rangle \cdot S \approx p \cdot S - \underbrace{nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + nmO(u^2)$$

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



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

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



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

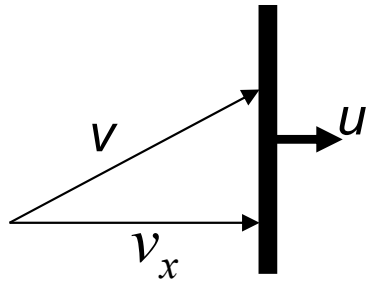
$$n \cdot m \langle (v_x - u)^2 \vartheta(v_x - u) \rangle \cdot S = p \cdot S - \underbrace{nm \langle |v_x| \rangle \cdot u}_{\text{brzdná síla}} + \cancel{nmO(u^2)}$$

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



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

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



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

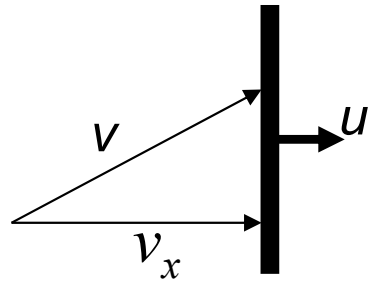
$$\langle F_+(t) - F_-(t) \rangle = \cancel{pS} - pS - \eta \cdot u$$

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



Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

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



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

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

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

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

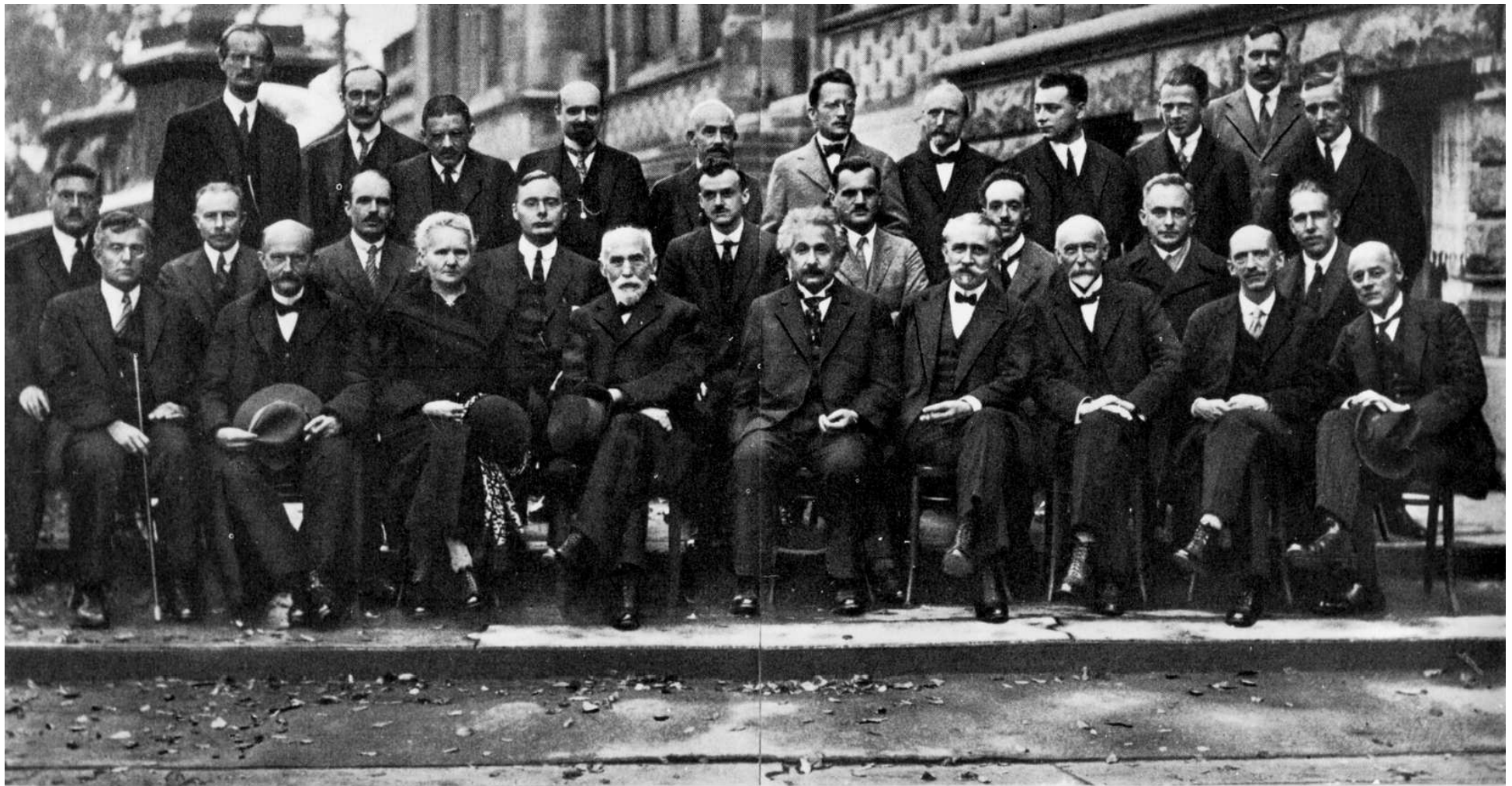
$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F_{\text{ext}} + F(t)$$

tření

vtištěná síla
(nenáhodná)

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
SÍLA

Solvayská konference 1927



Photographie Benjamin Couprie

28, Avenue Louise, Bruxelles

| | | | | | | | | |
|-------------|------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|------------------|-----------------|------------------|
| | | | | | | | R. H. FOWLER | |
| A. PICCARD | E. HENRIOT | | ED. HERZEN | TH. DE DONDER | E. SCHROEDINGER | W. PAULI | W. HEISENBERG | L. BRILLOUIN |
| | | | P. EHRENFEST | | | | E. VERSCHAFFELT | |
| P. DEBYE | M. KNUDSEN | W. L. BRAGG | H. A. KRAMERS | P. A. M. DIRAC | A. H. COMPTON | L. V. DE BROGLIE | M. BORN | N. BOHR |
| I. LANGMEIR | M. PLANCK | MADAME CURIE | H. A. LORENTZ | A. EINSTEIN | P. LANGEVIN | CH. E. GUYE | C. T. R. WILSON | |
| | | | | | | | | O. W. RICHARDSON |

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

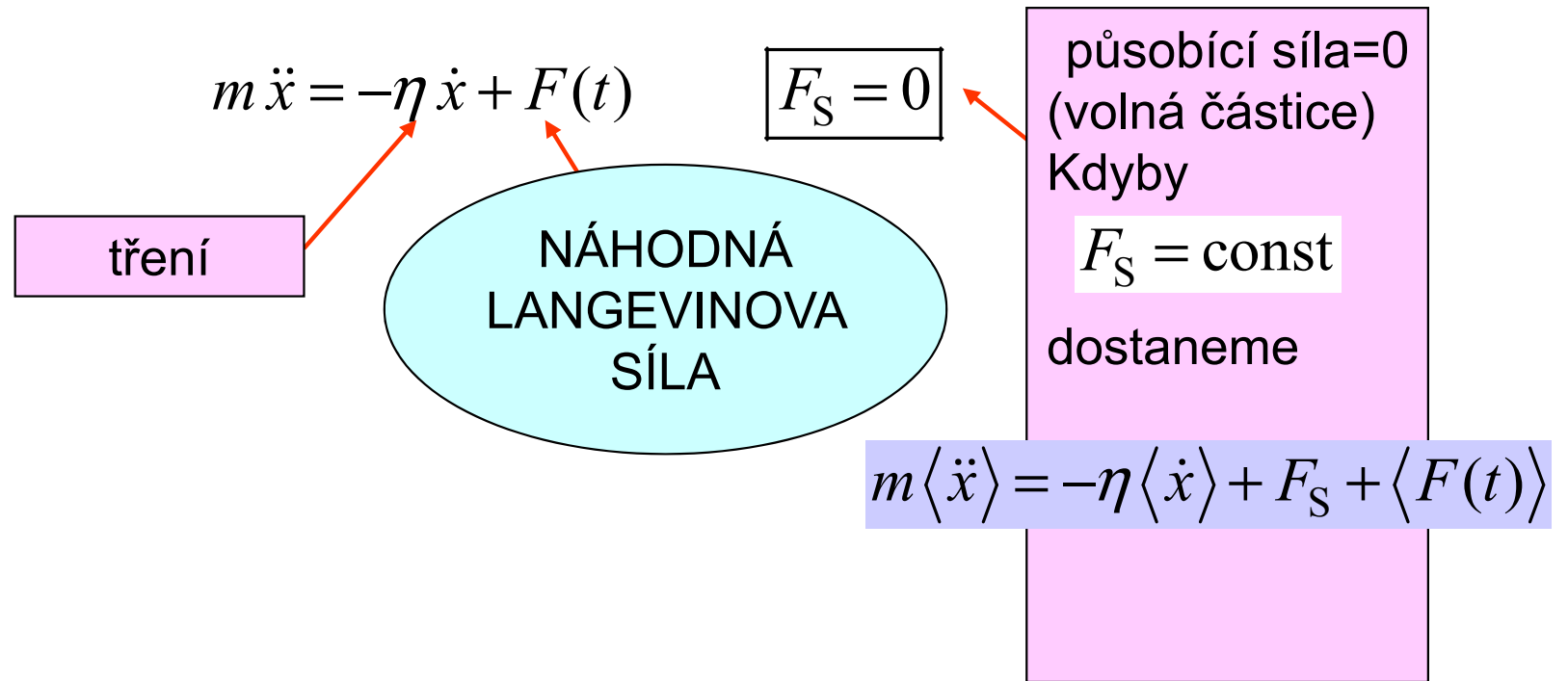
$$m \ddot{x} = -\eta \dot{x} + F(t)$$

$$F_S = 0$$

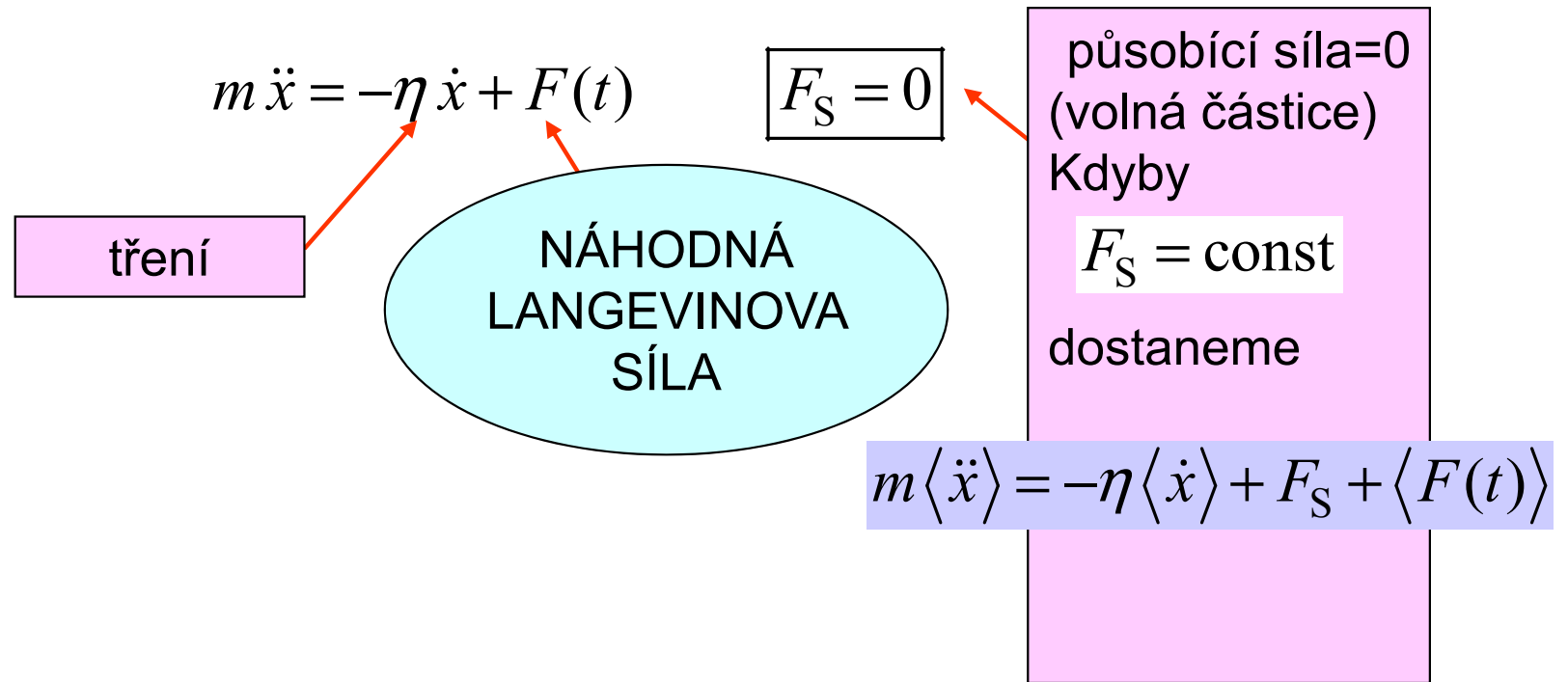
tření

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
SÍLA

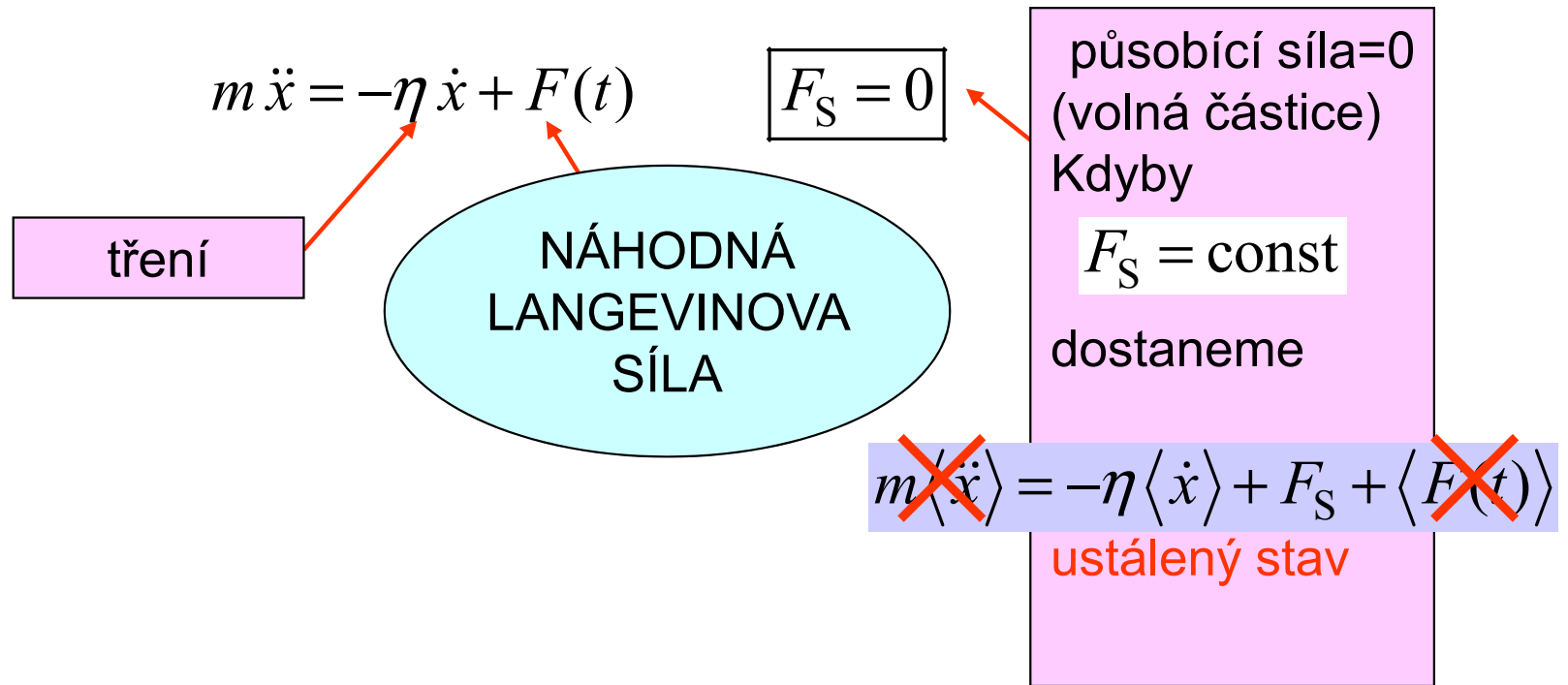
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



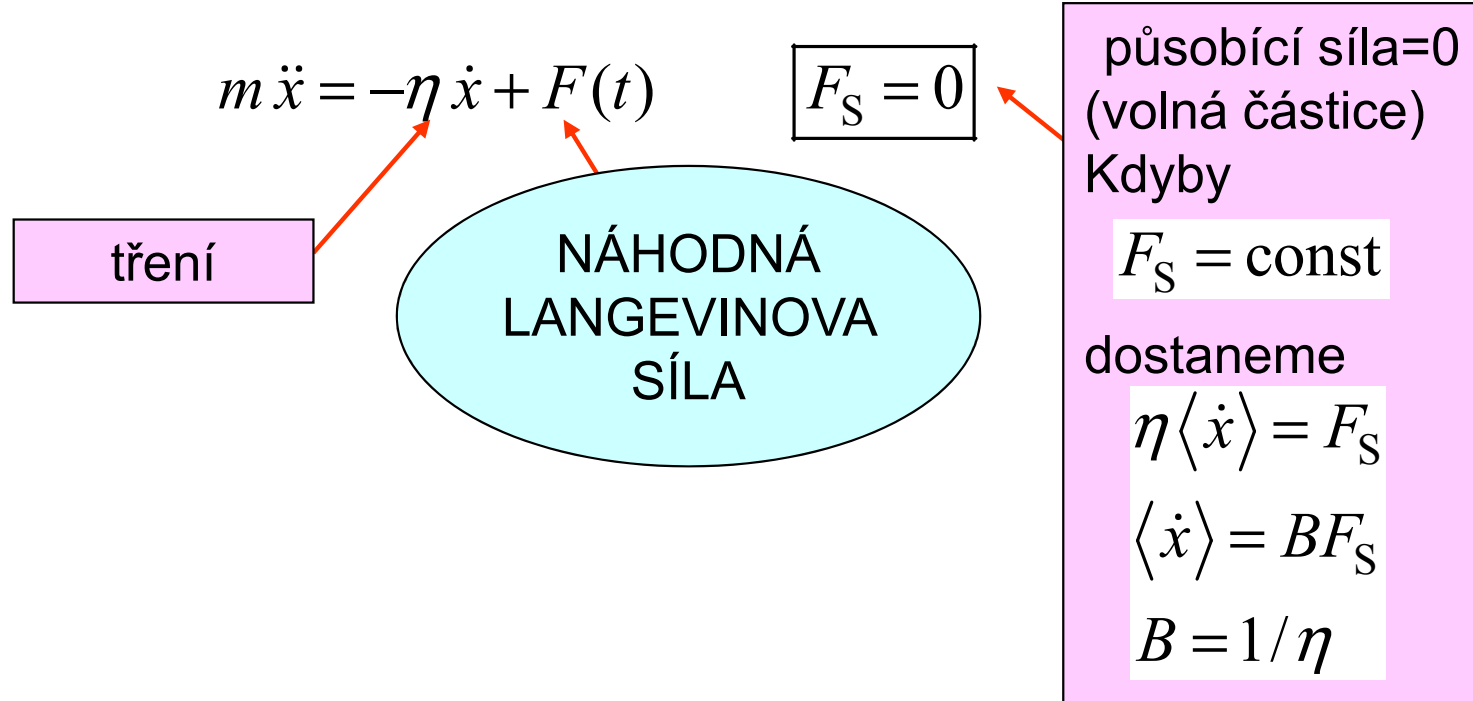
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



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
LANGEVINOVA
SÍLA

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
LANGEVINOVA
SÍLA

dělíme m

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

působící síla=0
(volná částice)
Kdyby

$$F_S = \text{const}$$

dostaneme

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

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

$$B = 1/m\gamma$$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$F_S = 0$$

tření

NÁHODNÁ
LANGEVINOVA
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

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

difusní limita

VÝSLEDEK

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

relaxační doba

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

♠ Pro $t \rightarrow \infty$

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} (t - \tau)$$

$$\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t$$

\Rightarrow identifikace $\frac{k_B T}{m\gamma} \equiv D$

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} (t - \tau)$$

$$\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t$$

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} (t - \tau)$$

$$\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t$$

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

♣ Pro $t \rightarrow 0$

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

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

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

♣ Pro $t \rightarrow 0$ $t \ll \tau$

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

Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

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

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau$$

relaxační doba

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

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} (t - \tau)$$

$$\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t$$

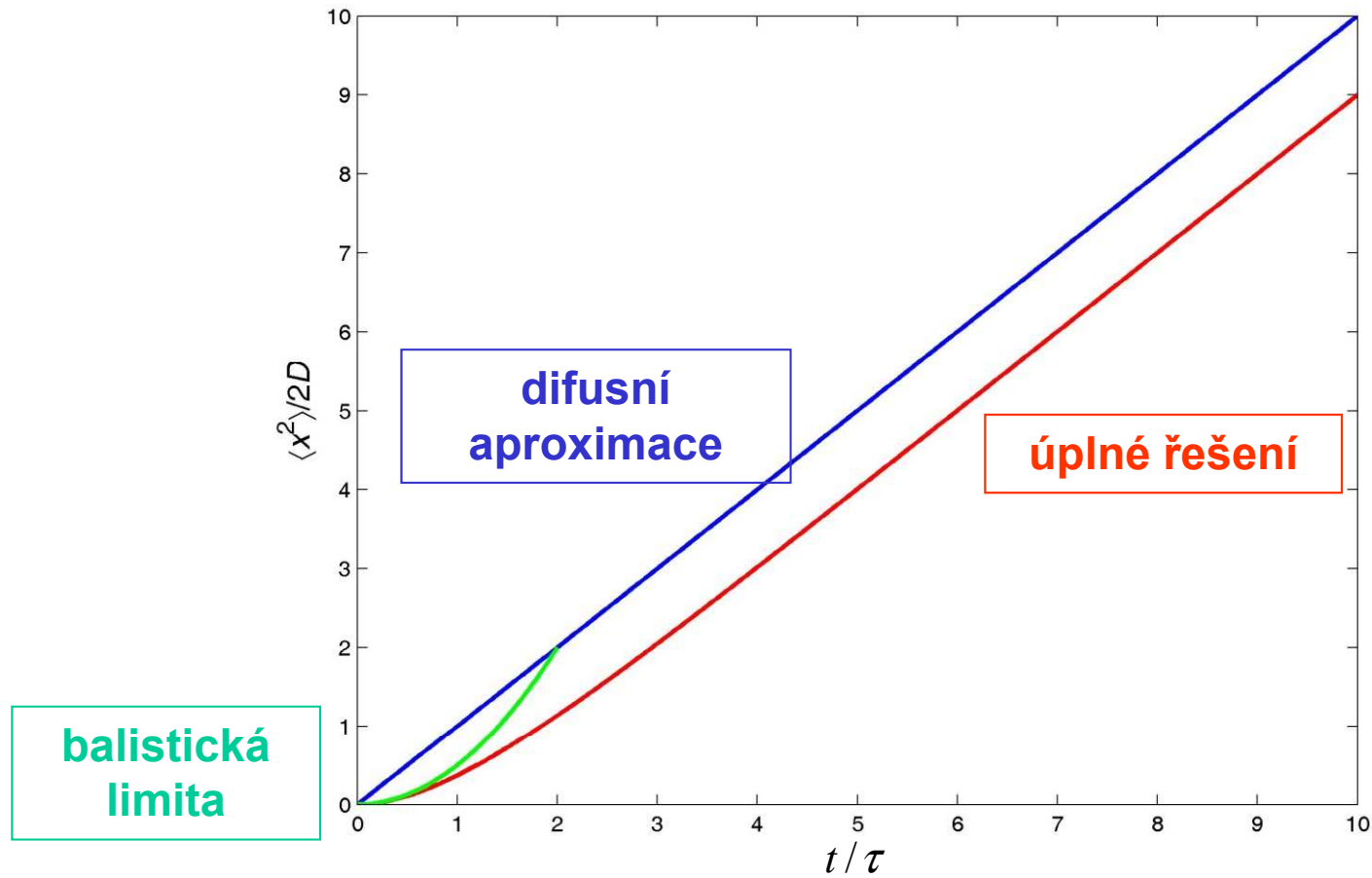
\Rightarrow identifikace $\frac{k_B T}{m\gamma} \equiv D$ $k_B T \cdot B = D$ EINSTEINŮV VZTAH

♣ 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

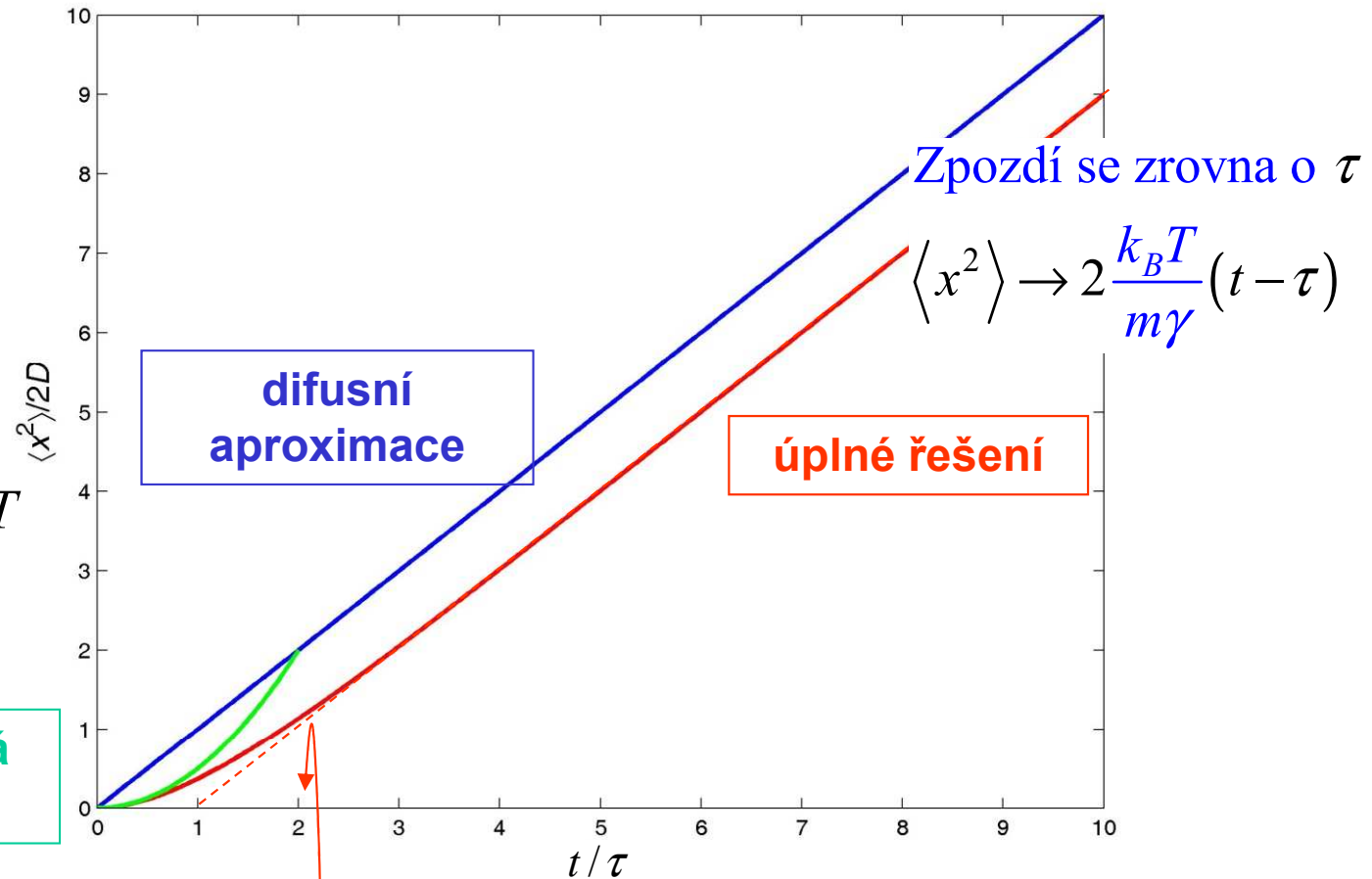


Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

Nezávisí na τ , jen na T

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow \frac{k_B T}{m} t^2$$

balistická
limita



Balistický rozlet je zpočátku pomalejší, pak ovšem roste kvadraticky i nadále a od $t = \tau$ je už mnohem rychlejší.

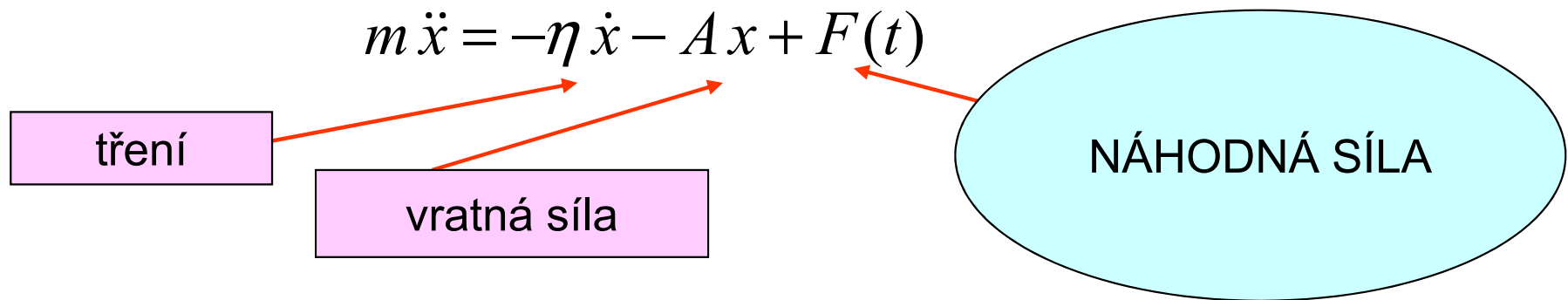
Crossover u τ odpovídá první srážce

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

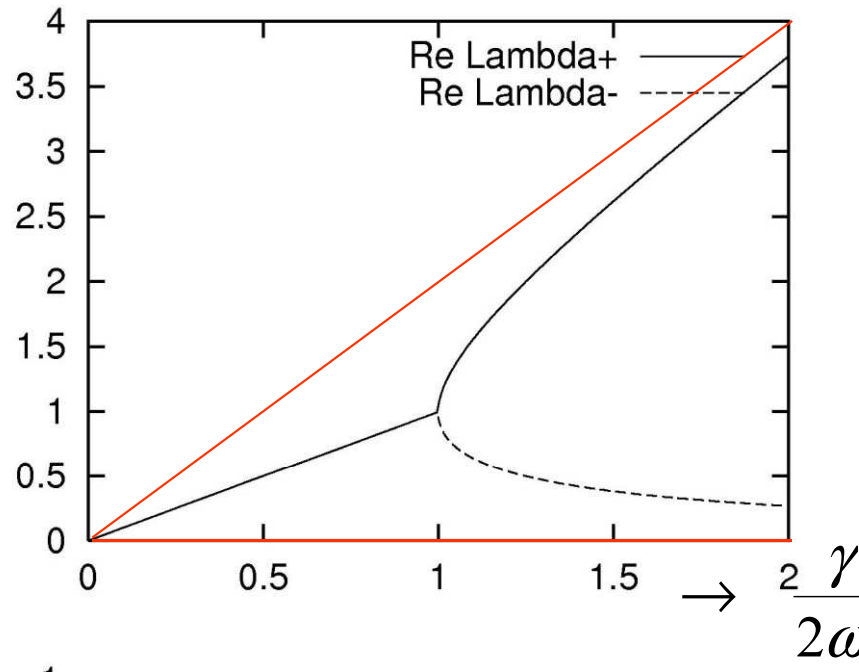
$$\frac{1}{2} \gamma = \omega_0$$

přetlumené kmity

Kořeny charakteristické rovnice

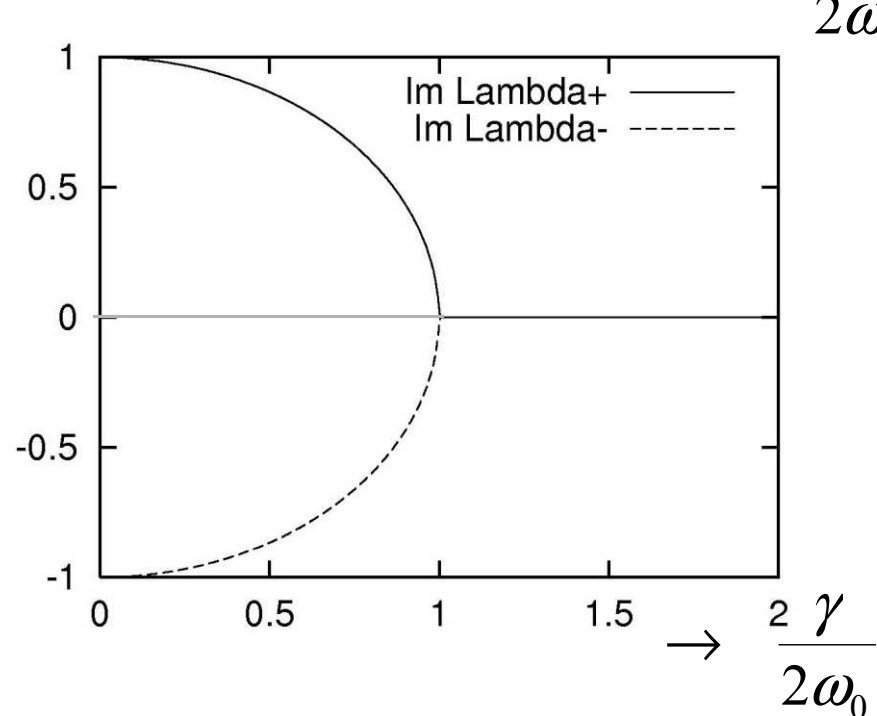
$$\frac{\lambda_{1,2}}{\omega_0} = \frac{\gamma}{2\omega_0} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2\omega_0}\right)^2 - 1}$$

$$\text{Re} \frac{\lambda_{1,2}}{\omega_0}$$



bezrozměrný parametr

$$\text{Im} \frac{\lambda_{1,2}}{\omega_0}$$

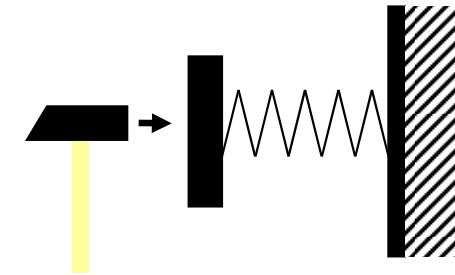


Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

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



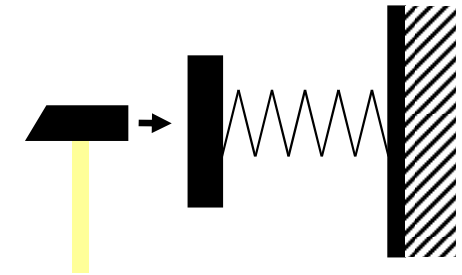
pulsní excitace

Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

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



akustická
měření
Greenovy
funkce
podle
definice
s kladívkem

Langevinova rovnice – Greenova funkce

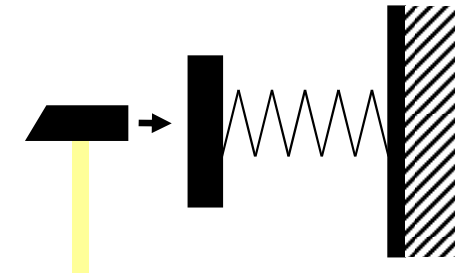
partikulární řešení nehomog. rovnice

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

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



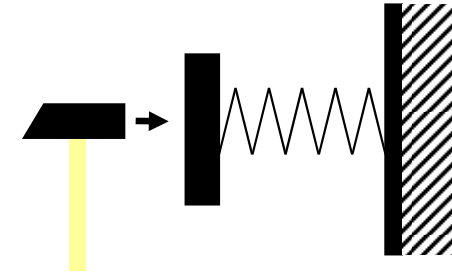
pulsní excitace

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:

Definujeme

$$L \equiv \frac{d^2}{dt^2} + \gamma \frac{d}{dt} + \omega_0^2 \quad (\text{dif. operátor})$$

Symbolicky $LG = \delta$

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

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 – odvození sešívacích podmínek

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 $t = t'$

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

$$\frac{d}{dt} G(t, t') \Big|_{t'-\delta}^{t'+\delta} + \gamma G(t, t') \Big|_{t'-\delta}^{t'+\delta} + \omega_0^2 \int_{t'-\delta}^{t'+\delta} dt G(t, t') = 1$$

Langevinova rovnice – odvození sešívacích podmínek

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 integrací po malém okolí bodu $t = t'$

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

$$\frac{d}{dt} G(t, t') \Big|_{t'-\delta}^{t'+\delta} + \gamma G(t, t') \Big|_{t'-\delta}^{t'+\delta} + \omega_0^2 \int_{t'-\delta}^{t'+\delta} dt G(t, t') = 1$$

$\delta \rightarrow +0$

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

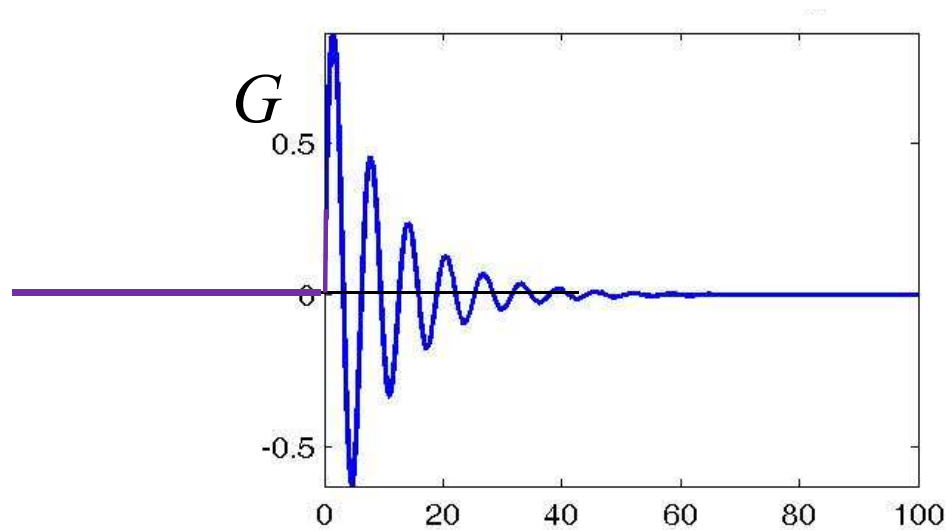
okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

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

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

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


Langevinova rovnice – ukázka Greenovy funkce



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

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

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

???

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

Langevinova rovnice – náhodná síla

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

Musíme se opřít o ekvipartiční
teorém

???

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

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

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

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

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

Langevinova rovnice – náhodná síla

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

Musíme se opřít o ekvipartiční teorem

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

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

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
teorém

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

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

Výsledek

připomíná
Einsteinův vztah
nezávisí na ω_0

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

stejný jako pro volnou
Brownovu částici

Shrnutí: výsledné formální řešení

$$x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 0$$

$$x(t) = 0 + 0 + \int_0^t dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$G(t-t') = -\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left\{ \exp(-\lambda_1(t-t')) - \exp(-\lambda_2(t-t')) \right\} \cdot \vartheta(t-t')$$

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

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t-t') \quad \frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

Shrnutí: výsledné formální řešení

$$x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 0$$

$$x(t) = 0 + 0 + \int_0^t dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$G(t-t') = -\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left\{ \exp(-\lambda_1(t-t')) - \exp(-\lambda_2(t-t')) \right\} \cdot \vartheta(t-t')$$

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

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t-t') \quad \frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

APLIKACE: ověření Langevinova Ansatzu

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

$$= \int dt' G(t-t') \langle f(t') f(t) \rangle$$

$$= \int dt' G(t-t') \Gamma \delta(t-t') = \Gamma G(0+0) = 0$$

Shrnutí: výsledné formální řešení

$$x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = 0$$

$$x(t) = 0 + 0 + \int_0^t dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$G(t-t') = -\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left\{ \exp(-\lambda_1(t-t')) - \exp(-\lambda_2(t-t')) \right\} \cdot \vartheta(t-t')$$

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

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t-t') \quad \frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

APLIKACE: ověření Langevinova Ansatzu

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

$$= \int dt' G(t-t') \langle f(t') f(t) \rangle$$

$$= \int dt' G(t-t') \Gamma \delta(t-t') = \Gamma G(0+0) = \underline{0}$$

Numerická integrace

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

formální řešení

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

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 pлавná)

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

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

Numerická integrace

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

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

diskrétní Gaussův
náhodný proces

rozdělení
pravděpodobnosti

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

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

Numerická integrace

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

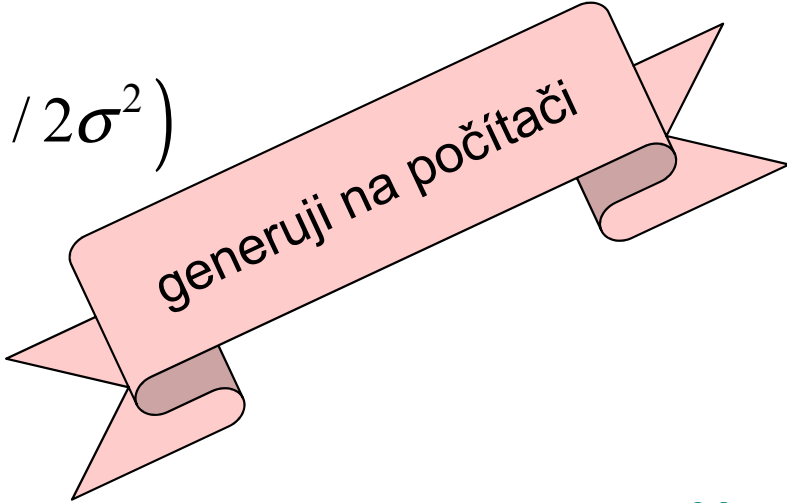
$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{f}^2 \rangle &= \left\langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \right\rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\
 &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2\Gamma \delta(t'-t'') = 2\Gamma \Delta t
 \end{aligned}$$

diskrétní Gaussův
náhodný proces

rozdělení
pravděpodobnosti

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

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



Numerická integrace

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

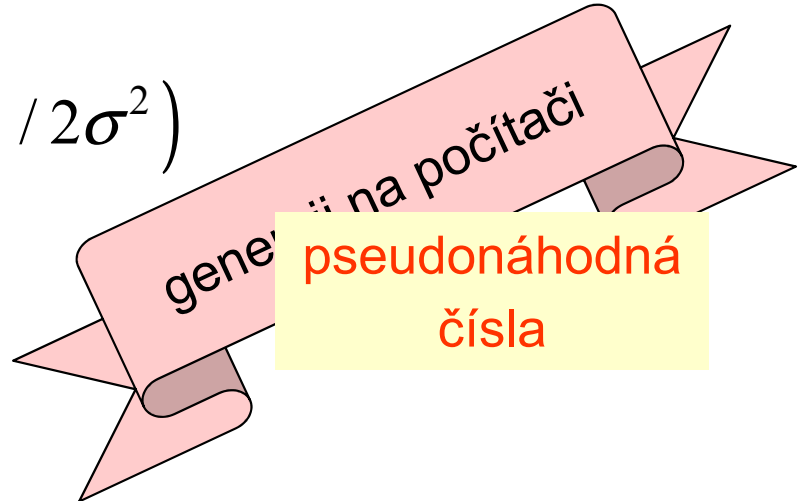
$$\begin{aligned}\langle \tilde{f}^2 \rangle &= \left\langle \int_{\Delta} dt' f(t') \int_{\Delta} dt'' f(t'') \right\rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' \langle f(t') f(t'') \rangle \\ &= \int_{\Delta} dt' \int_{\Delta} dt'' 2\Gamma \delta(t'-t'') = 2\Gamma \Delta t\end{aligned}$$

diskrétní Gaussův náhodný proces

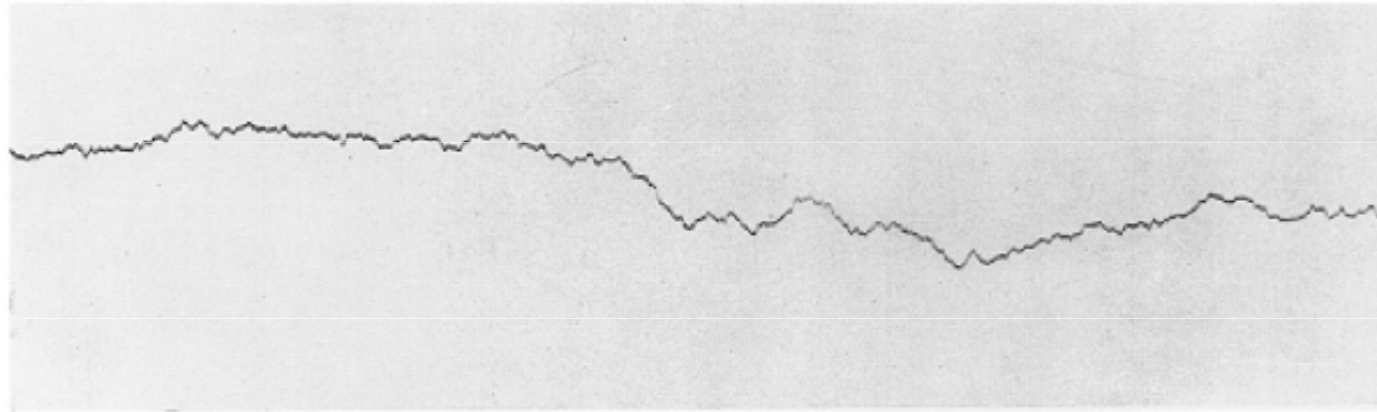
rozdělení pravděpodobnosti

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

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

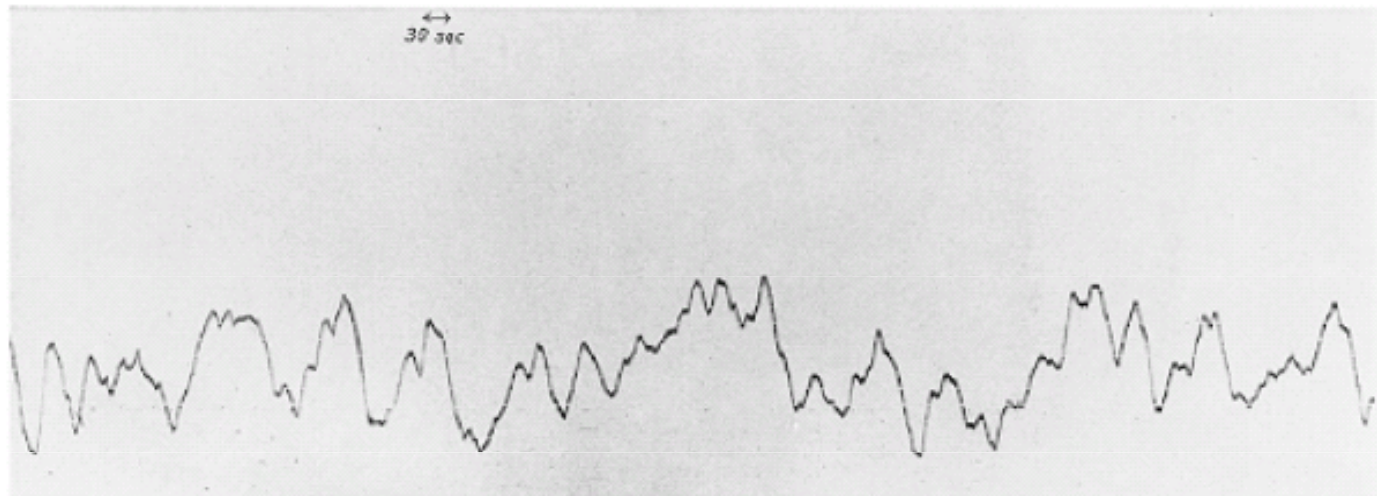


Ukázka Kapplerových měření



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. Skalabstand: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $d x = 2$ mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur 15° C

Fig. 4a

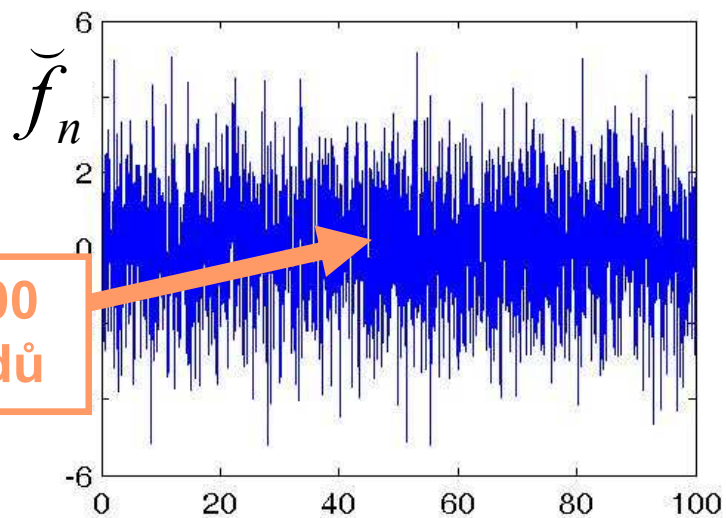
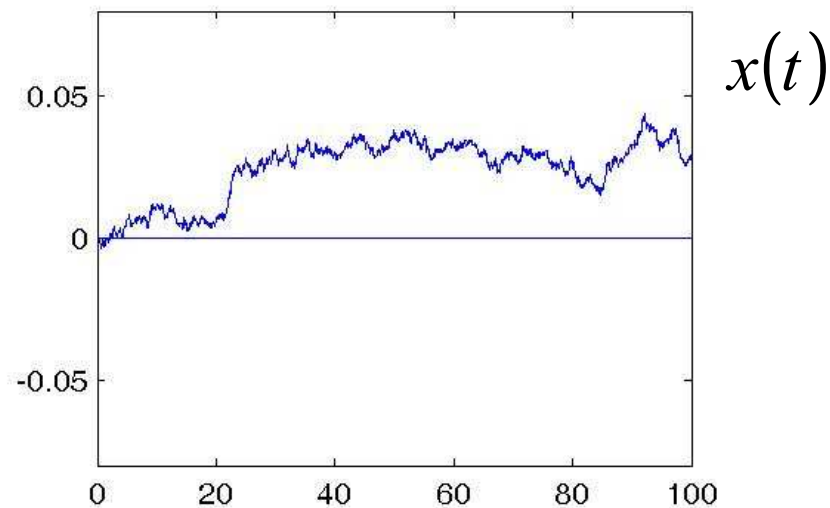
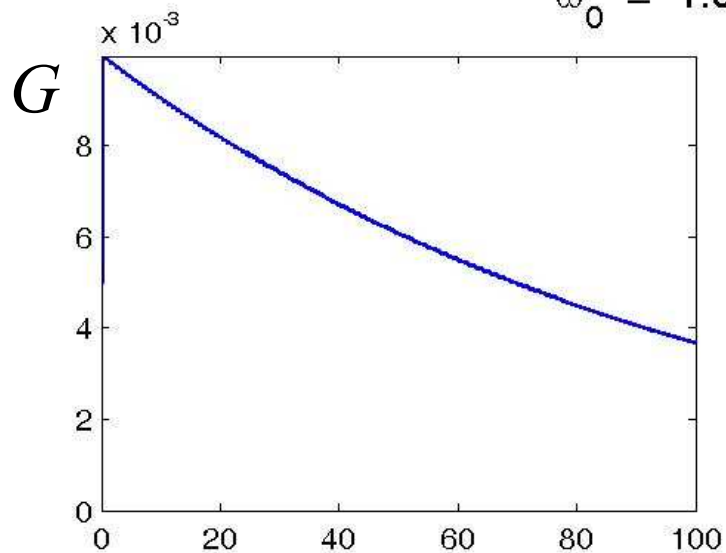


snížený tlak, podtlumený oscilátor

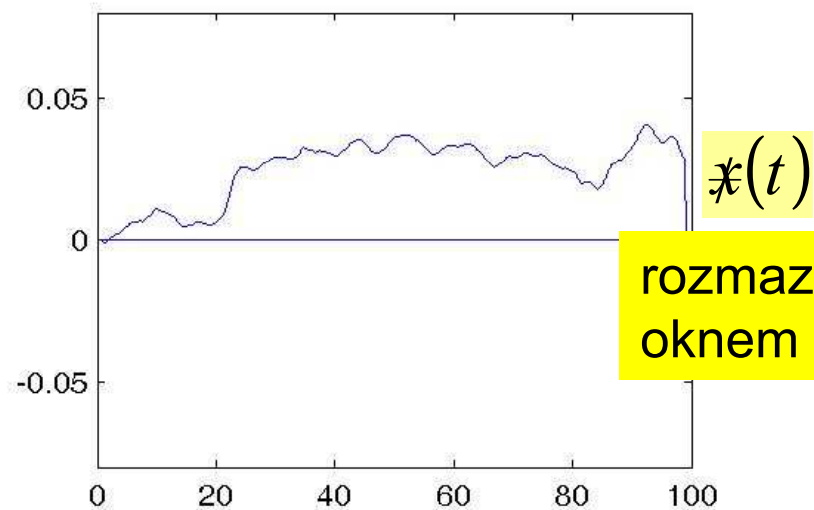
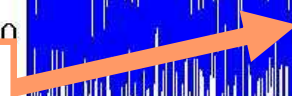
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $d x = 2$ mm. b) $4 \cdot 10^{-3}$ mm Hg. Temperatur 10° C

Fig. 4b

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



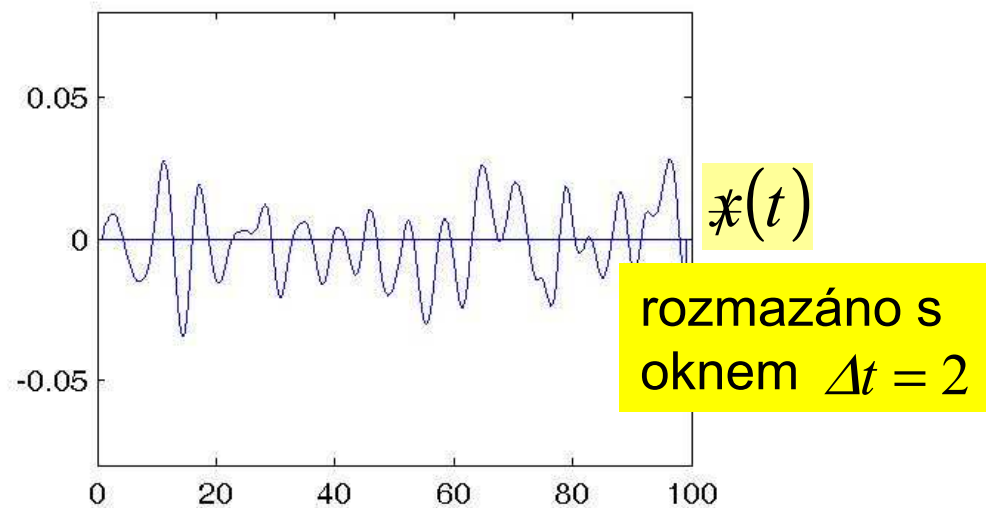
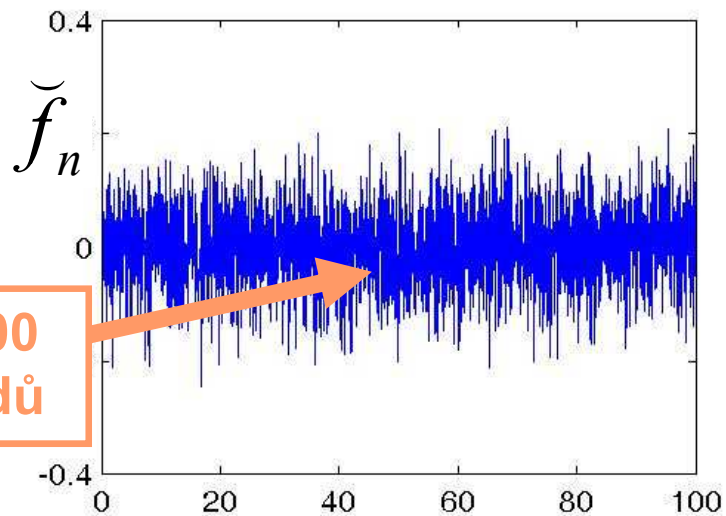
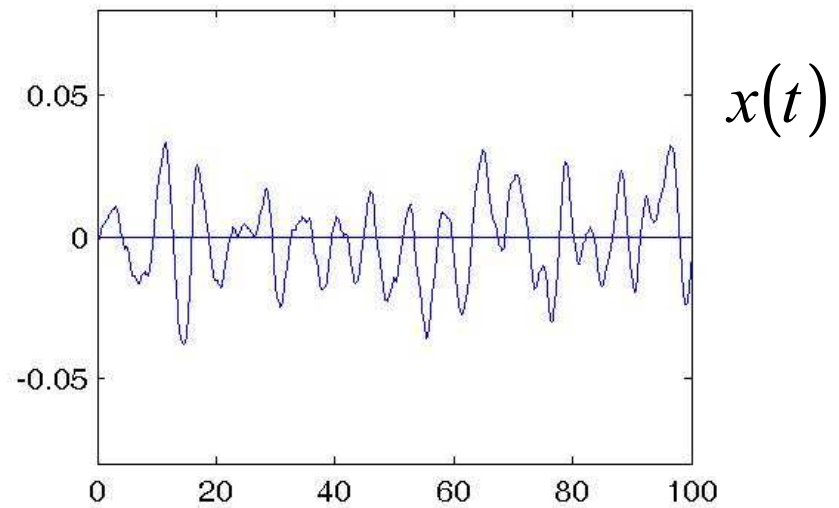
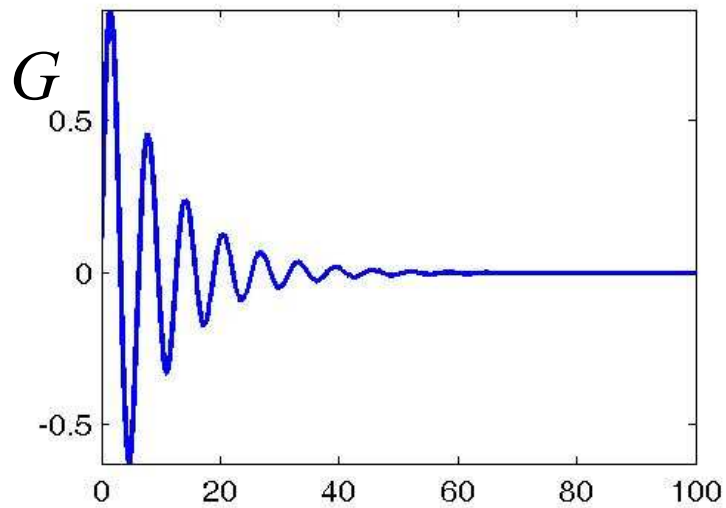
2500
bodů



rozmazáno s
oknem $\Delta t = 2$

→ čas

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



→ čas

Langevinova rovnice III.
(Brownův pohyb 2013)

Současná experimentální technika dovoluje sledovat trajektorii Brownovy částice a z toho odvodit i její **rychlost**

Tongcang Li and Mark G. Raizen:
Brownian motion at short time scales

Ann. Phys. (Berlin), 1–15 (2013) / DOI 10.1002/andp.201200232

Experimentální uspořádání

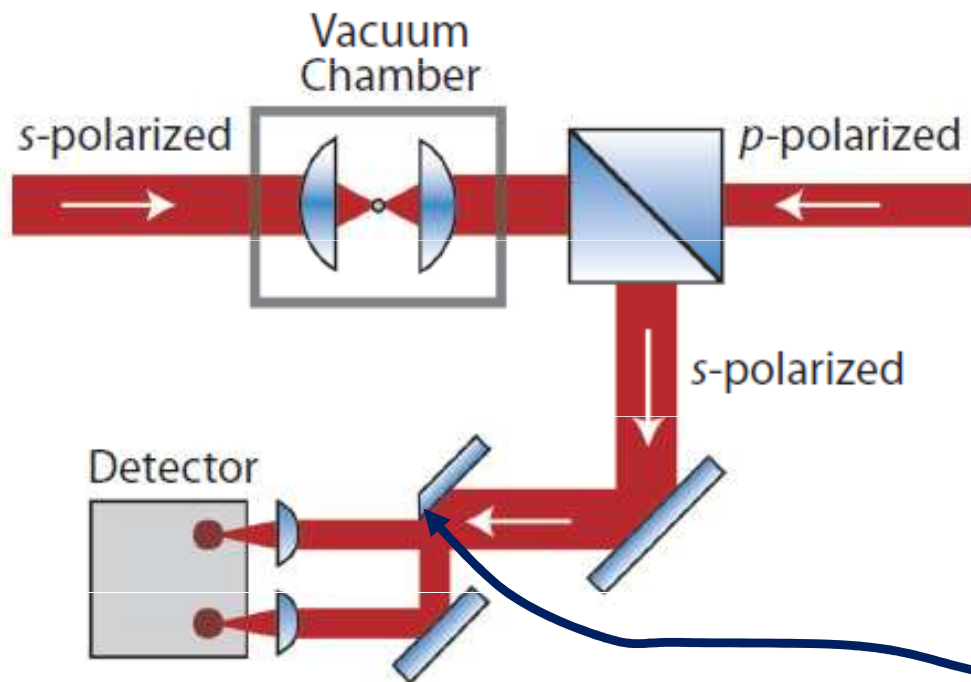


Figure 2 (online color at: www.ann-phys.org) This simplified schematic shows our counter-propagating dual-beam optical tweezers, and a novel detection system (Figure adapted from Ref. [21]). The s-polarized beam is reflected by a polarizing beam splitter cube after it passes through a trapped bead inside a vacuum chamber. Then, for detection, it is split by a mirror with a sharp edge. The p-polarized beam passes through the cube.

Optická pinseta drží křemenný korálek

Potenciální energie odpovídá harmonickému oscilátoru

Ve vakuové komoře je snížený tlak vzduchu

Korálek vykonává Brownův pohyb

Výchytky jsou monitorovány detekčním systémem

Základní vtip:

Dělení svazku zrcátkem s ostrou hranou

PROČ TAK „SLOŽITÉ“

- **Ve vzduchu delší relaxační doba**
- **Bez pinsety by korálek spadl**

Měření výchylek a rychlostí

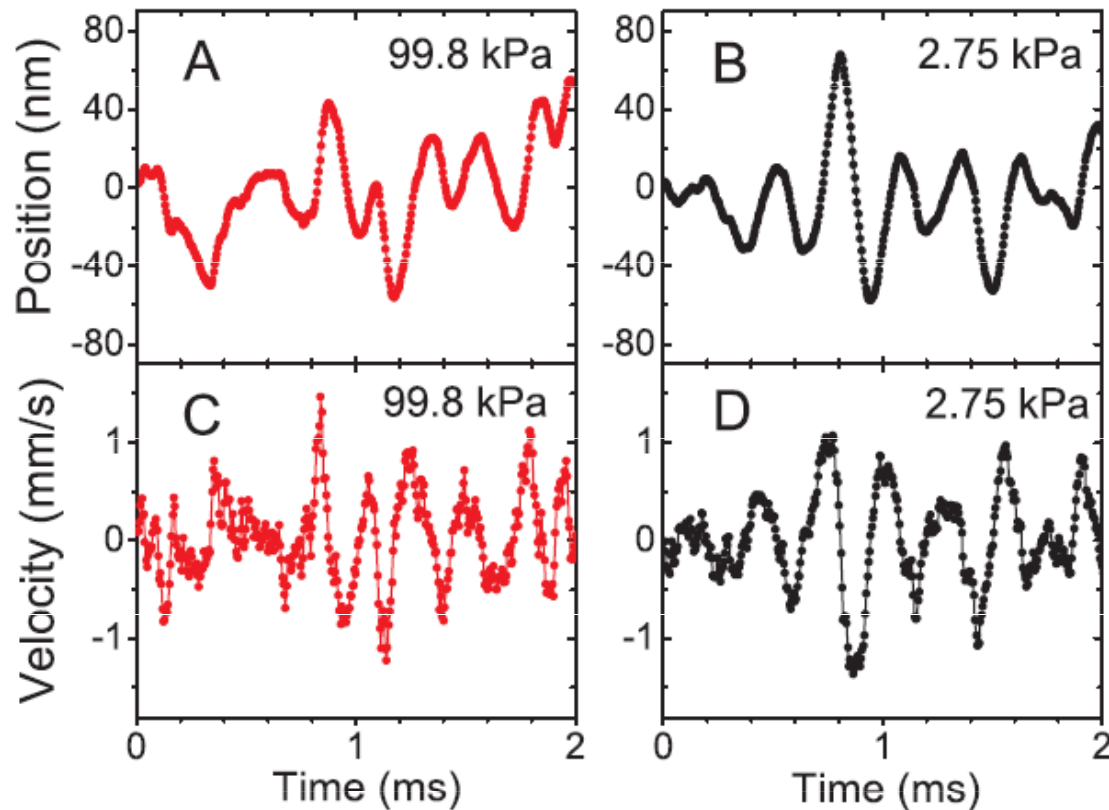
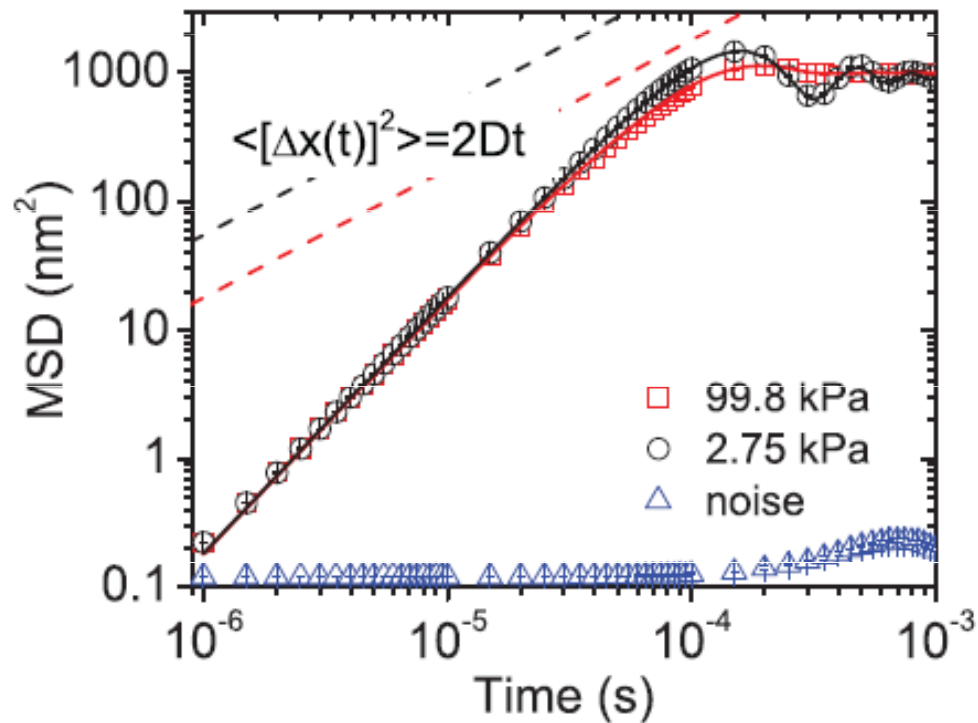


Figure 3 (online color at: www.ann-phys.org) One-dimensional trajectories of a 3 μm diameter silica bead trapped in air at 99.8 kPa (A) and at 2.75 kPa (B). The instantaneous velocities of the bead corresponding to these trajectories are shown in (C) and (D). Figure adapted from Ref. [21].

Je to obdoba Kapplerova měření, ale přeškálovaná do mesoskopických měřítek

Všimněte si irregularity rychlostí

Experiment se shoduje s Langevinovou rovnicí



Přímé měření $\langle x^2(t) \rangle$

- balistická část jako u volné částice
- následují oscilace postupně utlumené
- POZOR dvojlogaritmické měřítko

The end

Systematický popis termických fluktuací

termické fluktuace

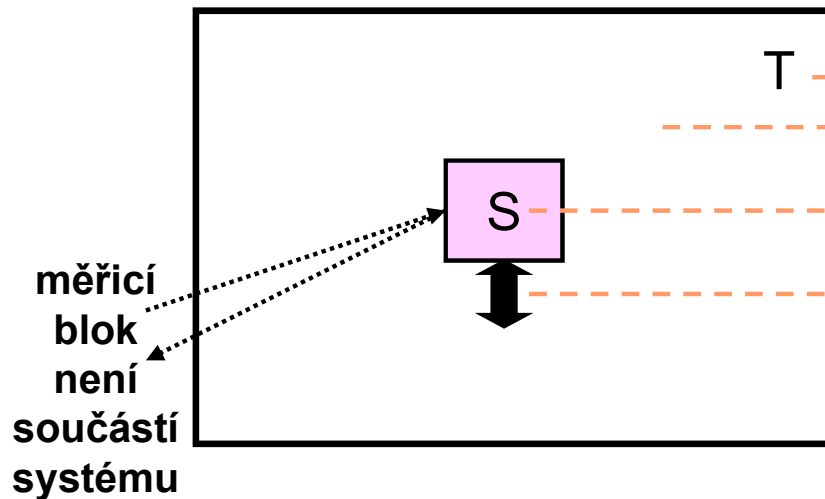
||

kvantové fluktuace

současnost

šum
noise

MAKROSKOPICKÁ APARATURA



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

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

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")

