

**F4110**  
**Kvantová fyzika atomárních soustav**  
**letní semestr 2009 - 2010**

**III.**  
**Tepelné fluktuace: lineární oscilátor**

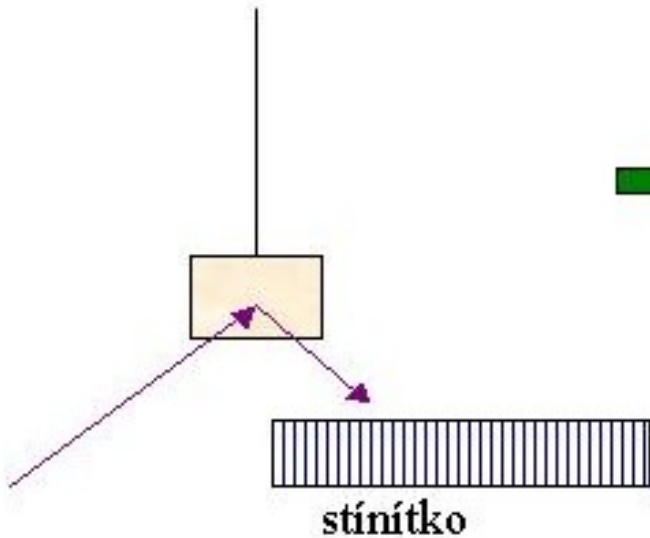
**KOTLÁŘSKÁ 10. BŘEZNA 2009**

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

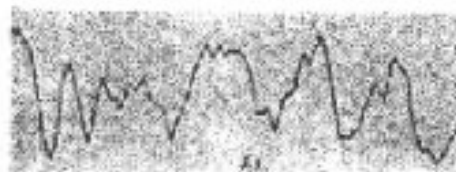
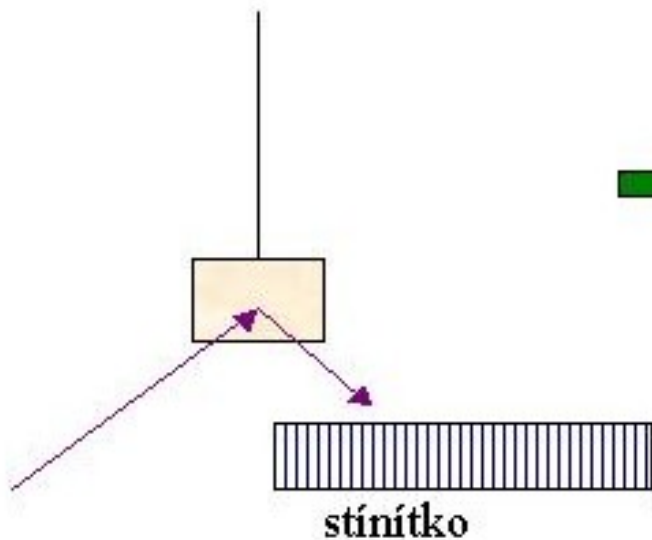
$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} A \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

$$R = k_B N_A$$

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

# Poslední folie před týdnem – Kapplerův pokus

1931 Kappler



atmosférický tlak

tlak klesá




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

**Ekvipartiční  
zákon**  $\Rightarrow$

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

$$R = k_B N_A$$

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

## *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  $\varphi$ ) ●
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  $\varphi$ ) 
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  $\odot$
2. Použijeme ekvipartičního zákona na zobecněnou souřadnici (úhel  $\varphi$ )  $\odot$
3. Je tu ovšem skrytá záměna středovacích procedur:

Kappler počítal časovou střední hodnotu

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

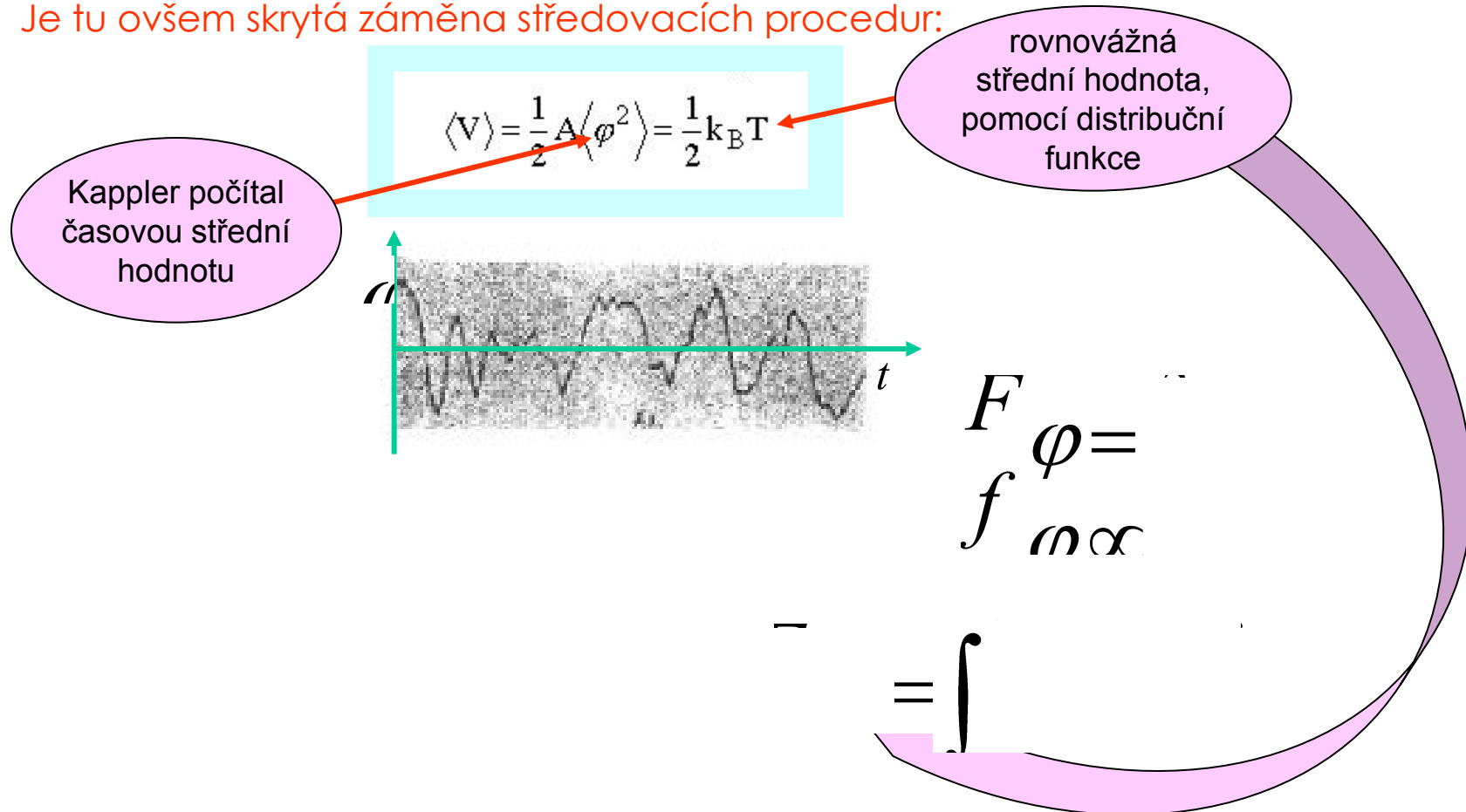
rovnovážná střední hodnota, pomocí distribuční funkce





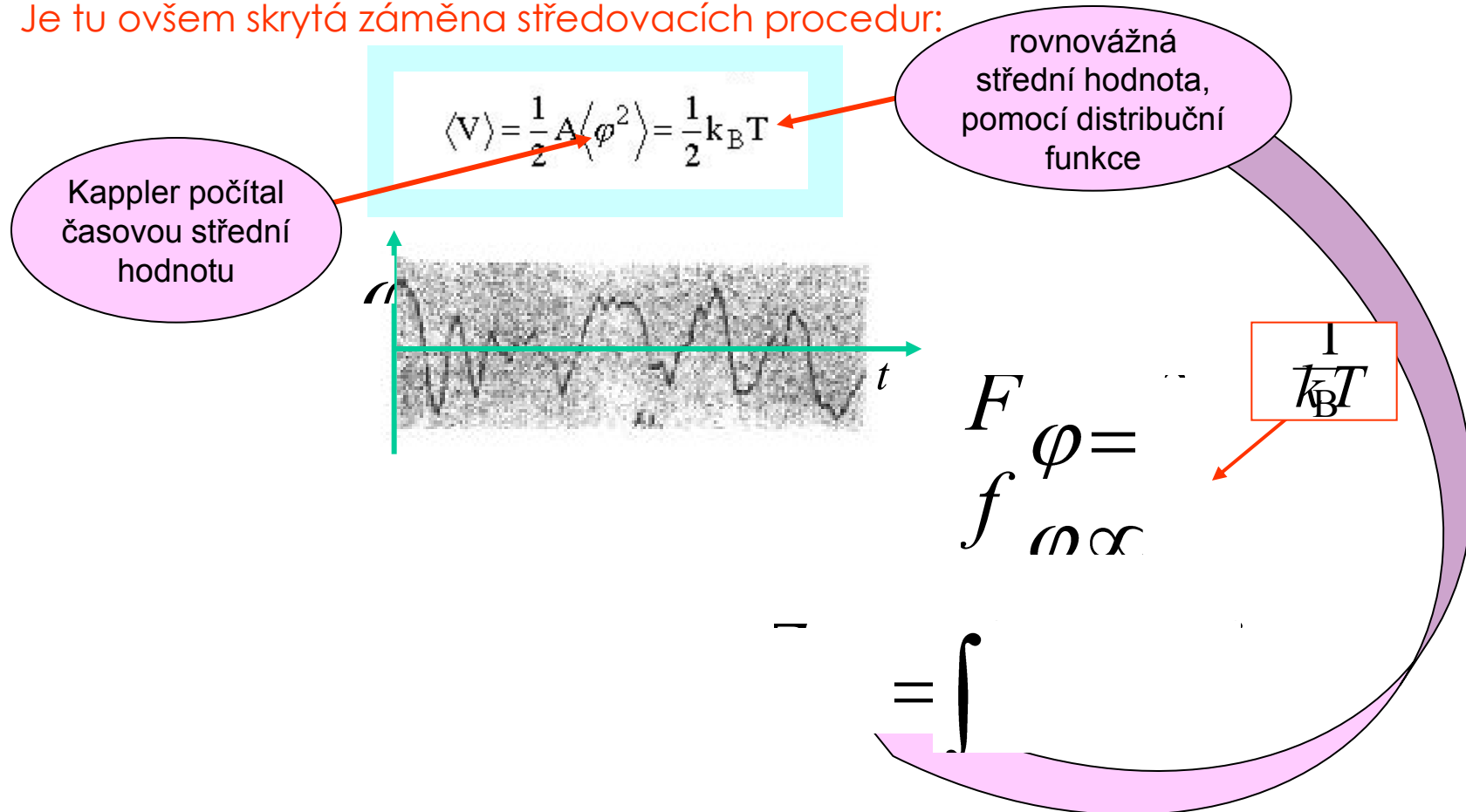
# Bližší pohled na odvození z přednášky

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



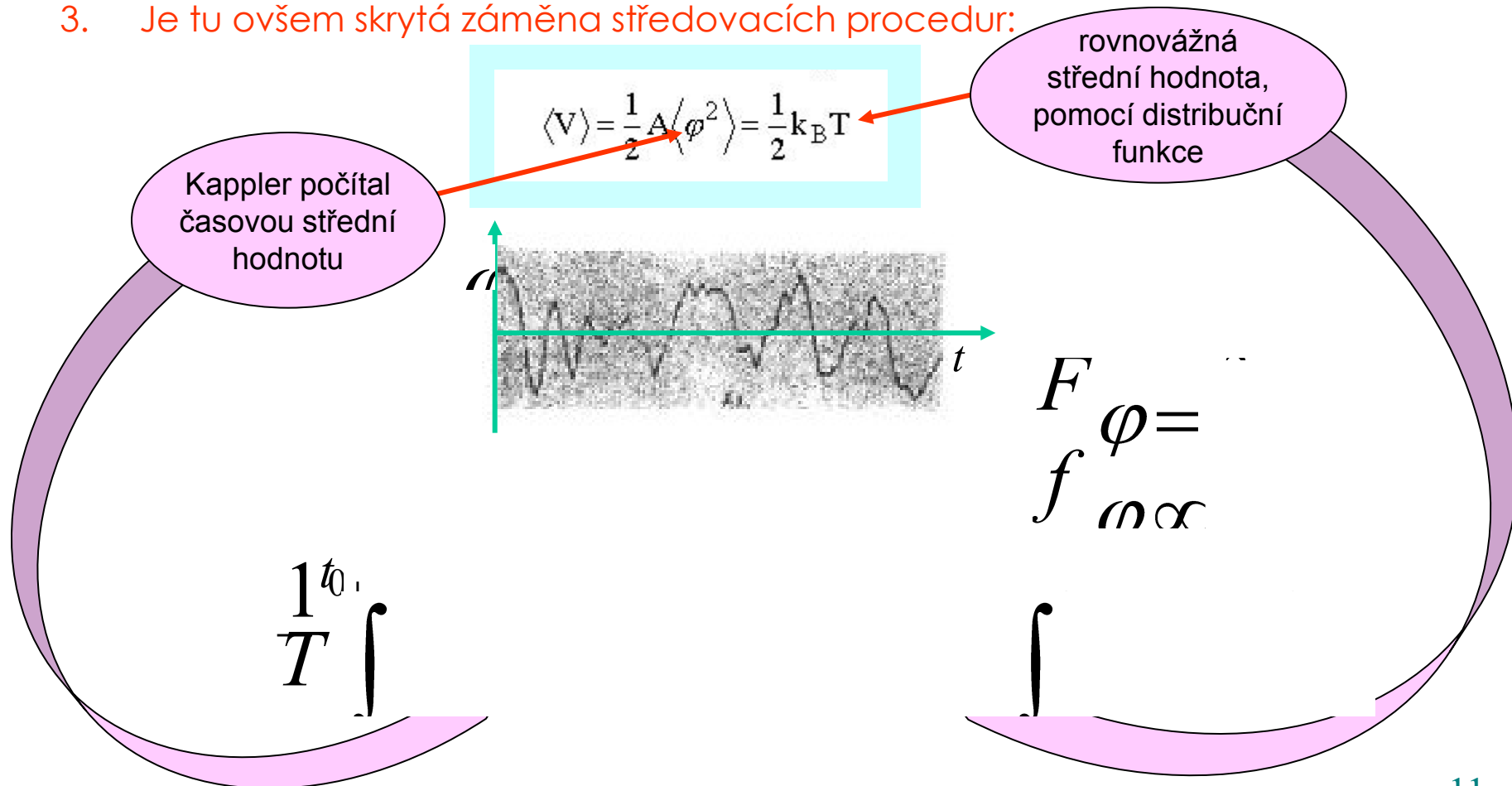
# Bližší pohled na odvození z přednášky

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



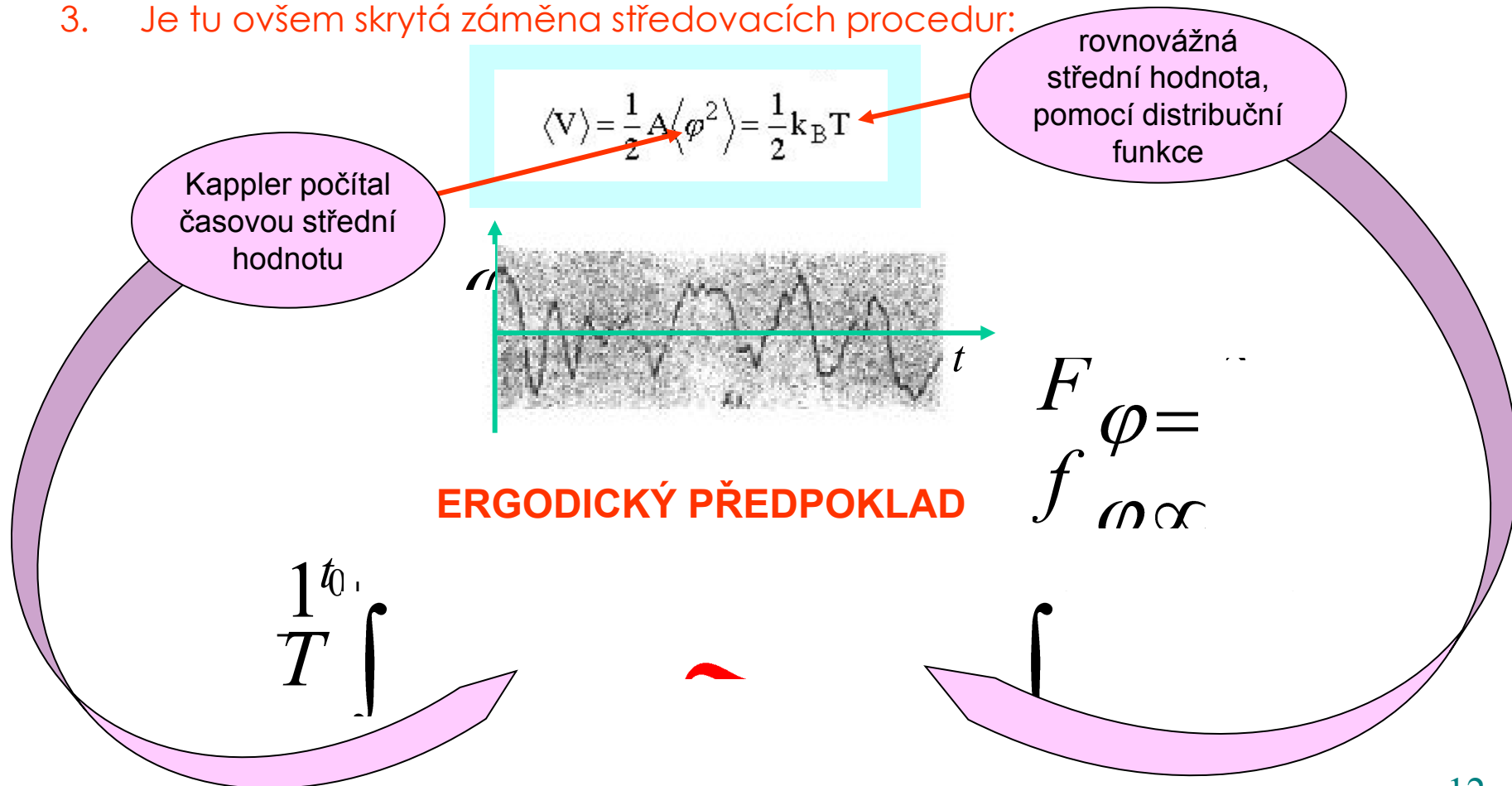
# Bližší pohled na odvození z přednášky

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



# 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**

$$\frac{1}{T} \int_{t_0}^{\dots} \dots \int$$

## *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

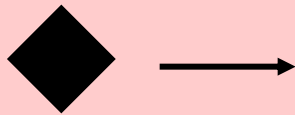
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

*mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV*

1) Brownova částice

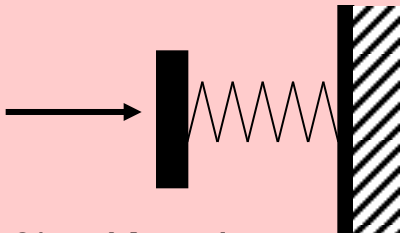
*volný translační (+ volný rotační) pohyb*



$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \dots$$

2) pérové váhy

*mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou*



$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

3) Kapplerovo zrcátko

*těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou*



$$H = \frac{I^2}{2} + \dots + \frac{1}{2}k\hat{\varphi}^2$$

# Naše volba pro konkrétnost představy

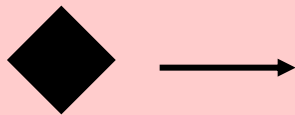
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

*mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV*

1) Brownova částice

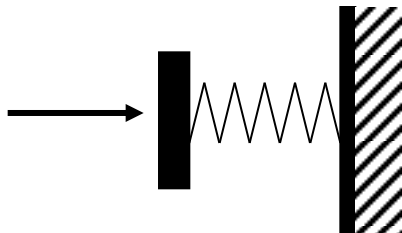
*volný translační (+ volný rotační) pohyb*



$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \dots$$

2) pérové váhy

*mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou*



$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

3) Kapplerovo zrcátko

*těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou*



$$H = \frac{I^2}{2} + \frac{1}{2}k\hat{\varphi}^2$$



# Naše volba pro konkrétnost představy

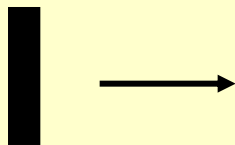
globální stupně volnosti

- translační
- rotační

*mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV*

1) Brownova částice

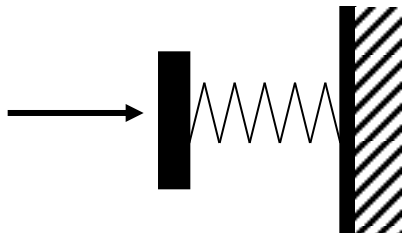
*volný translační pohyb v jedné dimenzi*



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

2) pérové váhy

*mezipřípad: translační pohyb s vratnou silou*



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

3) Kapplerovo zrcátko

*těžiště pevné, rotace okolo osy s vratnou silou*



$$H = \frac{I\dot{\varphi}^2}{2} + \frac{1}{2}k\varphi^2$$

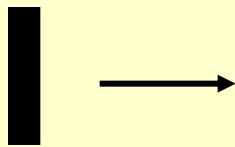
# Naše volba pro konkrétnost představy

globální stupně volnosti

- translační
- rotační

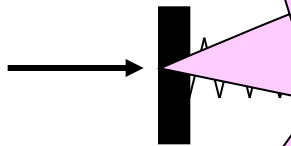
*mohou být exaktně odděleny od vnitřních SV*

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



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

2) pérové váhy



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

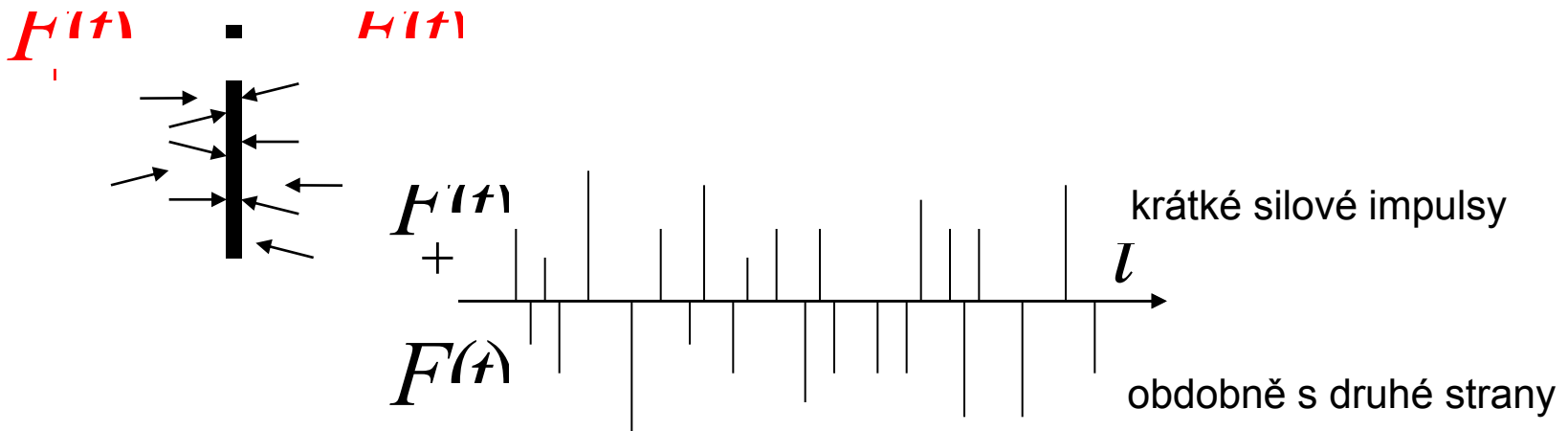
**NÁHODNÉ SÍLY**

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



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

# Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu



Síla na stojící destičku  $F(t)_{-}$   $(t)$

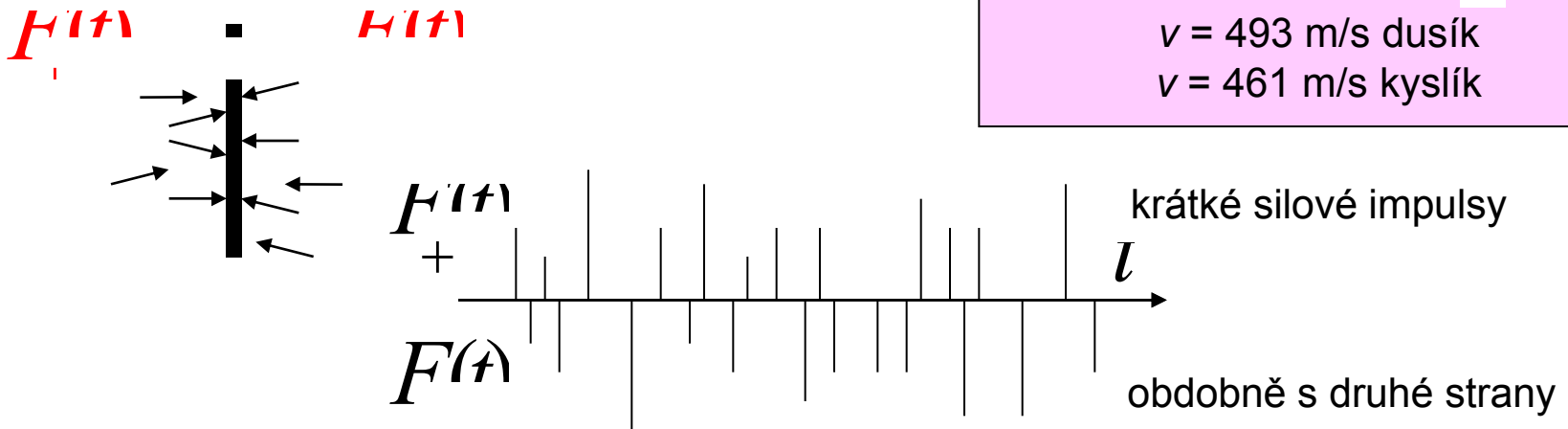
Impulse síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int \approx \sum$$

# 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. =  $1.30 \times 10^{22}$   
 $v = 493$  m/s dusík  
 $v = 461$  m/s kyslík



Síla na stojící destičku  $F(t)$

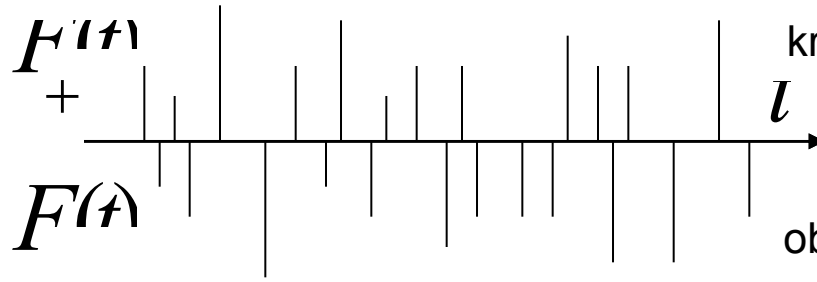
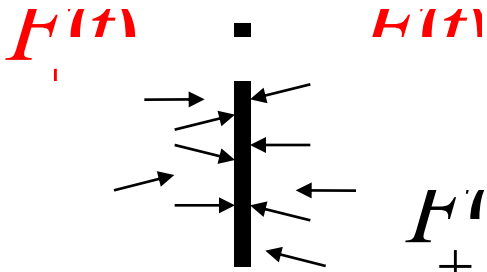
Impulse síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int \approx \sqrt{\quad}$$

# 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. =  $1.30 \times 10^{22}$   
 $v = 493$  m/s dusík  
 $v = 461$  m/s kyslík



krátké silové impulsy  
 obdobně s druhé strany

Síla na stojící destičku

$$F(t) = \dots$$

$\sim 10^{16}$  nárazů/ $\mu$ s

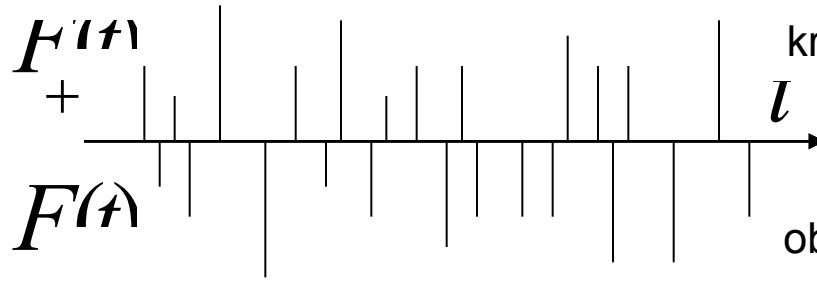
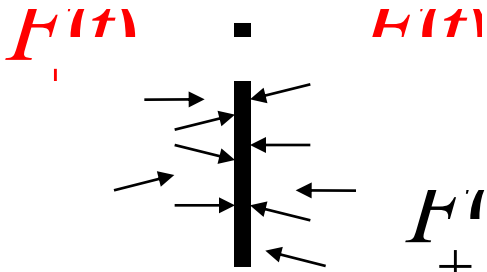
Impulse síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

$$\int \dots \approx \sqrt{\dots}$$

# 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. =  $1.30 \times 10^{22}$   
 $v = 493$  m/s dusík  
 $v = 461$  m/s kyslík



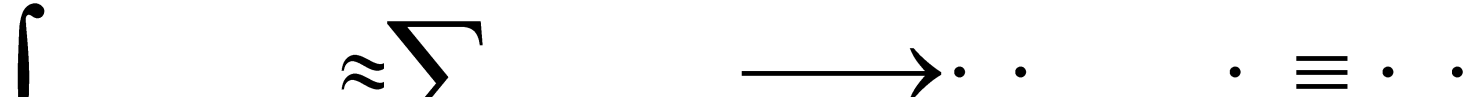
krátké silové impulsy  
 obdobně s druhé strany

Síla na stojící destičku

$$F(t) = \dots$$

$\sim 10^{16}$  nárazů/ $\mu$ s

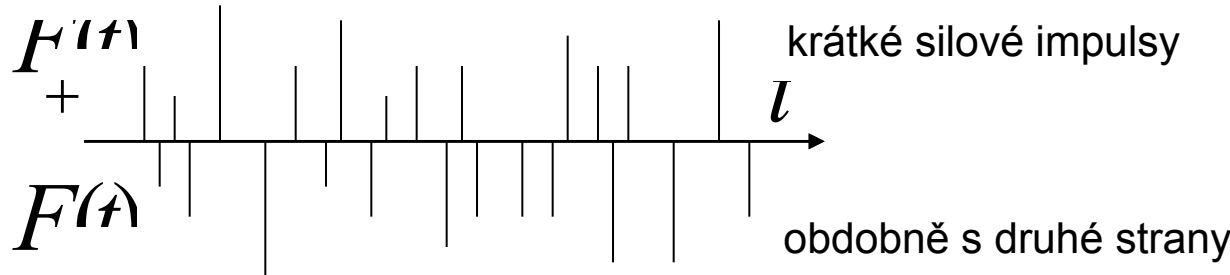
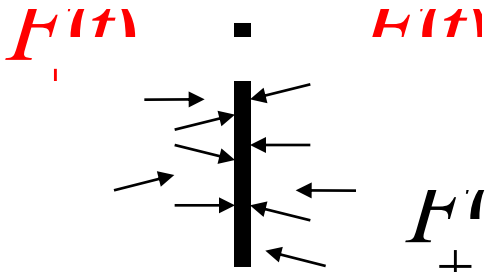
Impulse síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou



# 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. =  $1.30 \times 10^{22}$   
 $v = 493$  m/s dusík  
 $v = 461$  m/s kyslík



Síla na stojící destičku

$$F_{\perp}(t) = \dots$$

$\sim 10^{16}$  nárazů/ $\mu$ s

Impulse síly za dobu makroskopicky krátkou, pro molekuly dlouhou

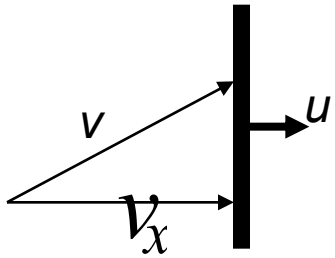
$$\int \dots \approx \sum \dots \longrightarrow \dots \equiv \dots$$

Střední síla na stojící destičku

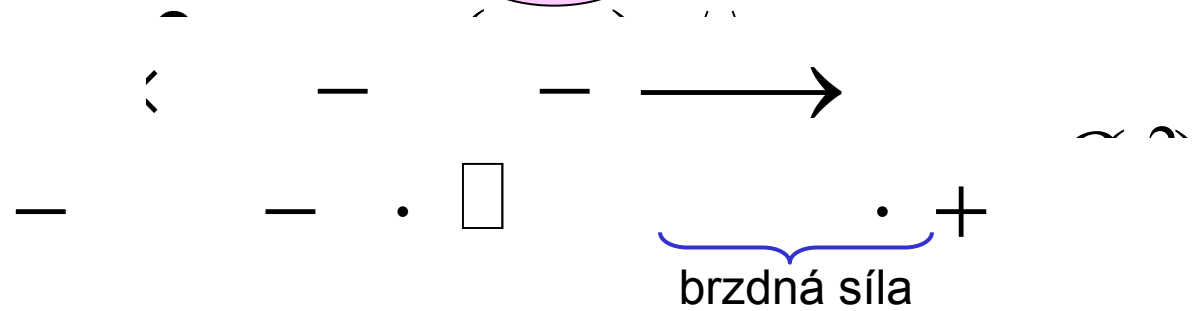
$$\langle F_{\perp}(t) \rangle = p \Delta$$

# Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku  $u$



$$\sum$$



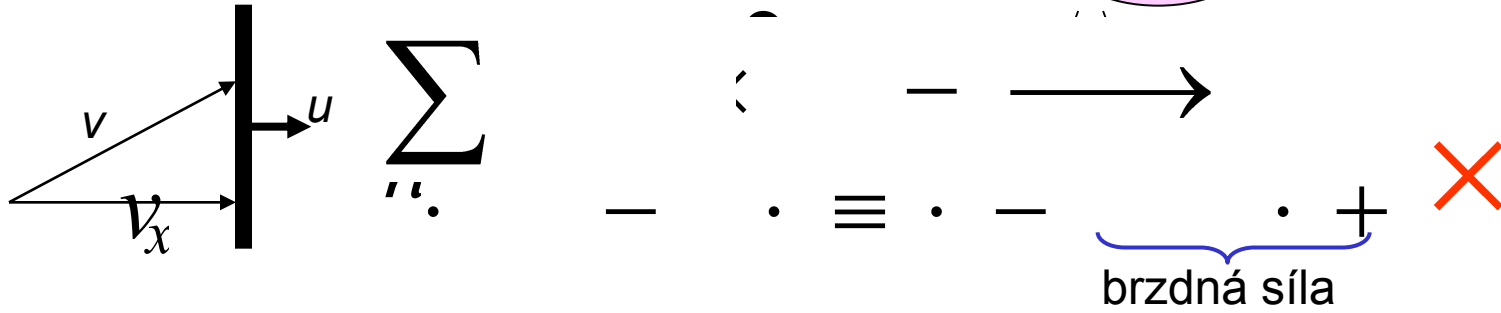
$$\langle F_x \rangle =$$





# Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku  $u$

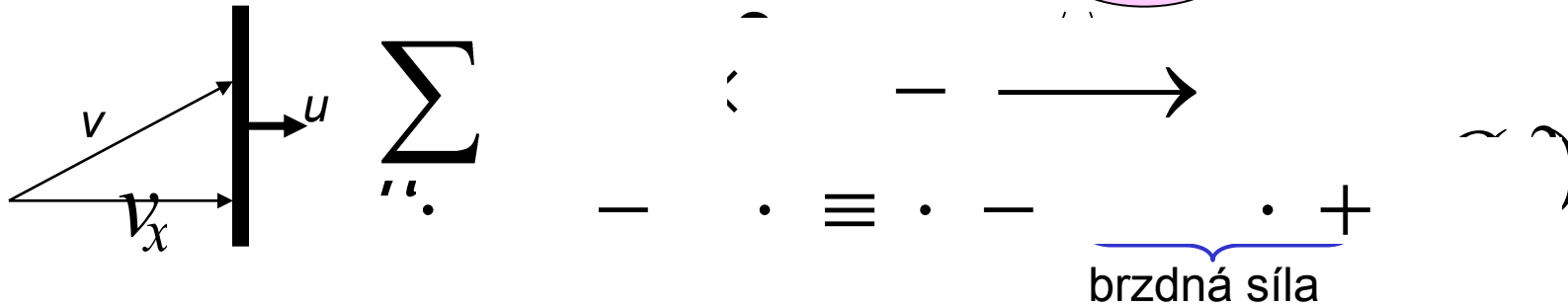


$$\langle F_x \rangle = \dots$$



# Náhodná síla na destičku působená nárazy molekul plynu

Střední síla na pomalu se pohybující destičku  $u$



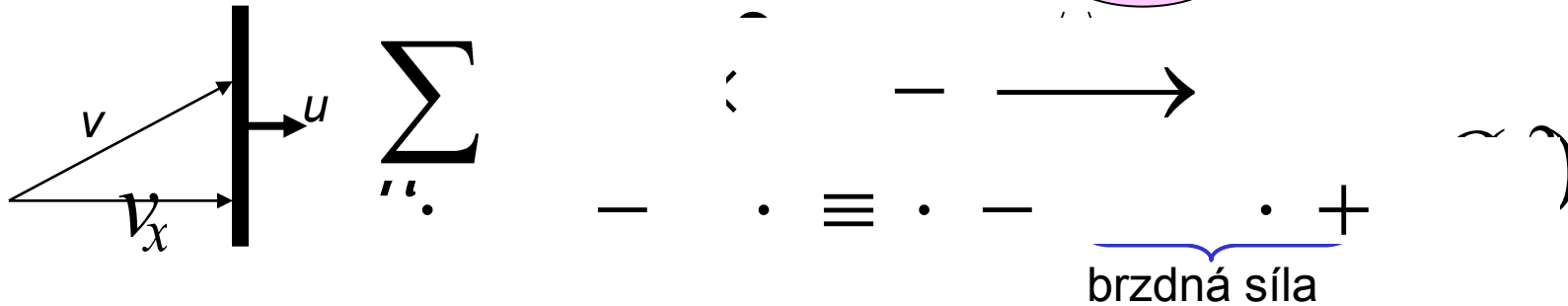
$$\langle F_x(t) \rangle = -\eta u$$

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  $u$



$$\langle F(t) \rangle = -\gamma u$$

Objevila se disipativní síla úměrná rychlosti !!

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

Náhodná složka síly  $F = \dots = \dots$

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

$$\langle F(t)F(t') \rangle = \dots$$

nulová střední síla

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.

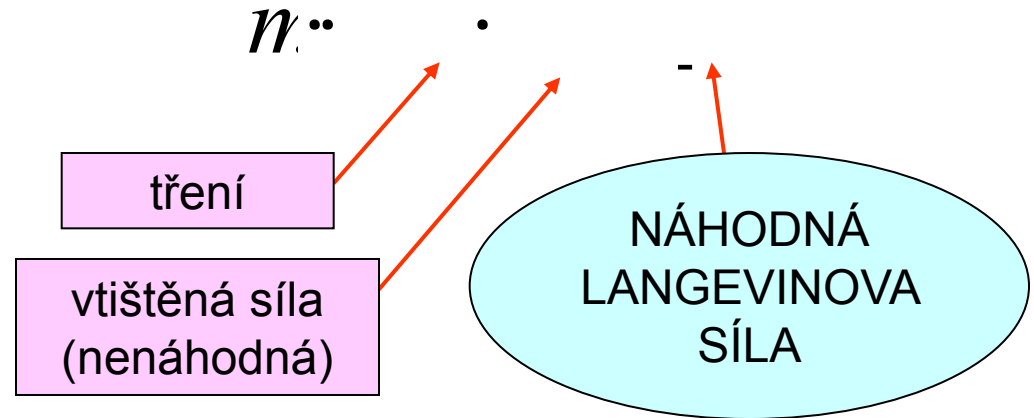
# Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem



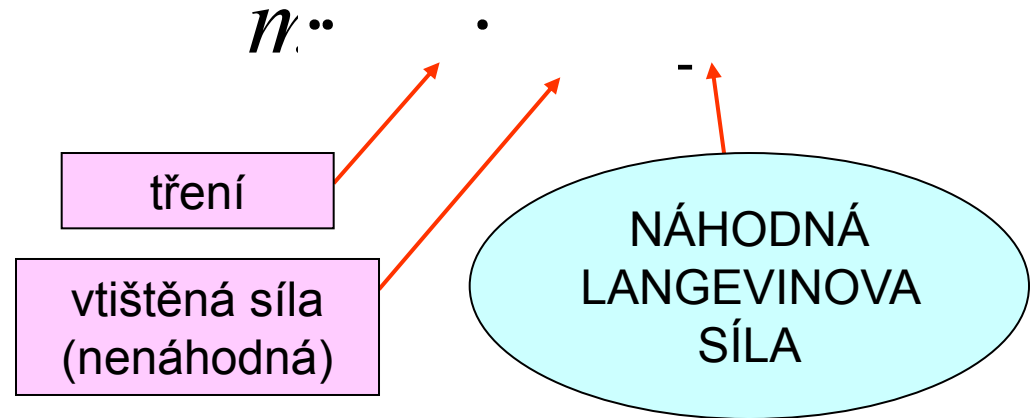
# Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem



Náhodná síla spolu s třením odrážejí účinek termostatu na systém

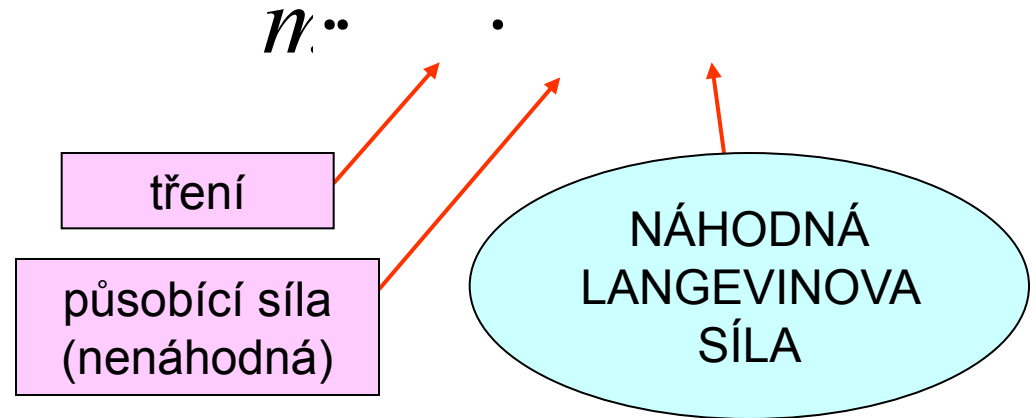
# Langevinova rovnice

Paul Langevin (1872 -- 1946)



Lorentz, Einstein and Langevin in 1927

1907 navrhl pohybovou rovnici pro částici propojenou s termostatem



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.

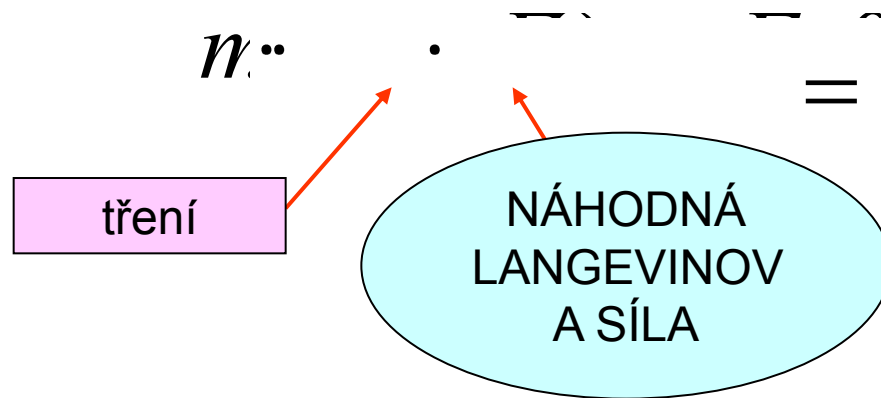
Významné pokroky v pochopení.

Difusní řešení je správné v limitě dlouhých časů.

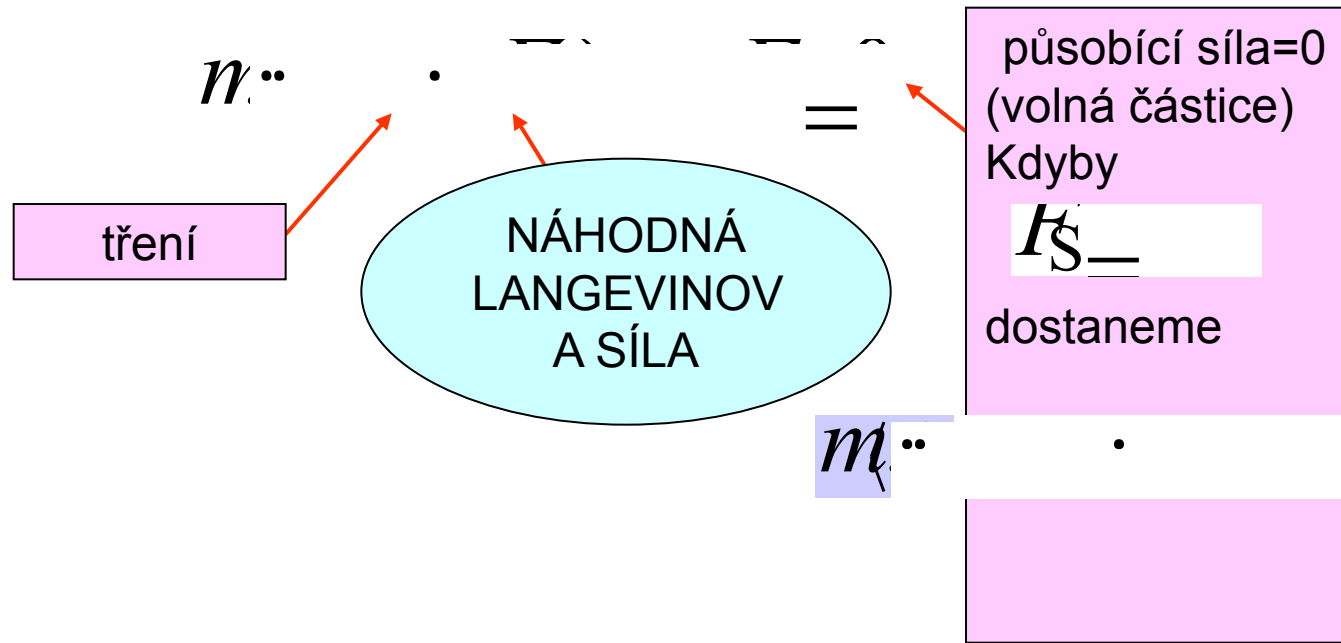
Pro krátké časy se projeví inerciální efekty



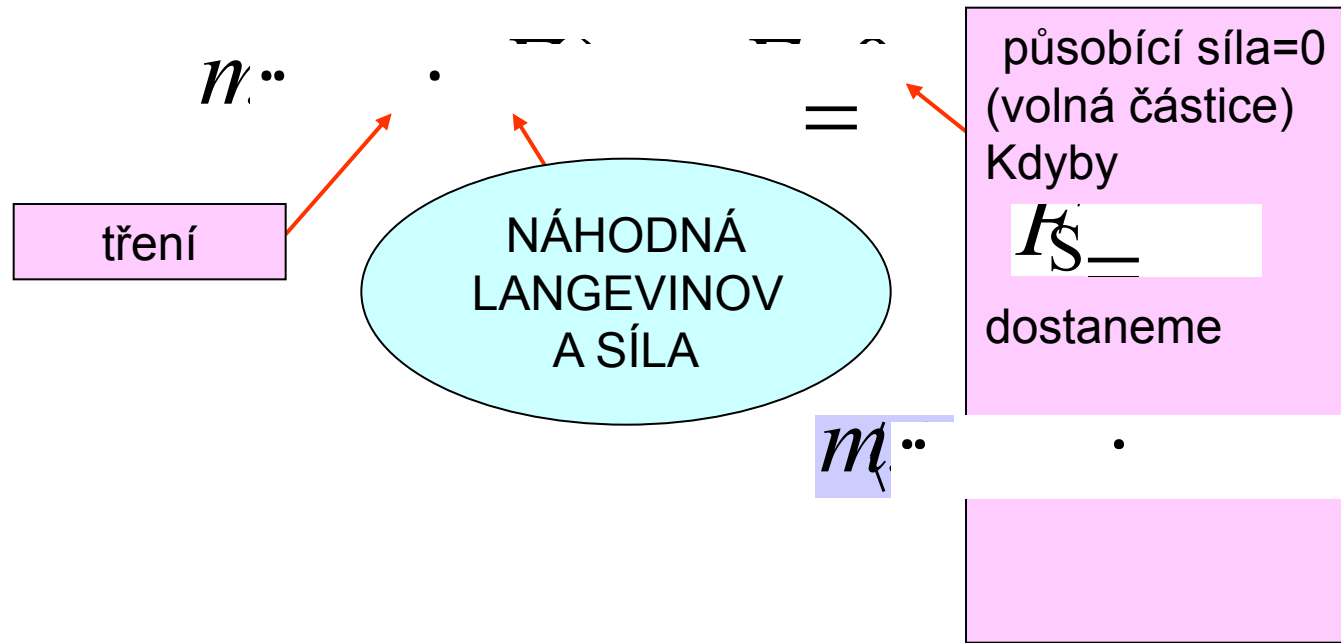
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



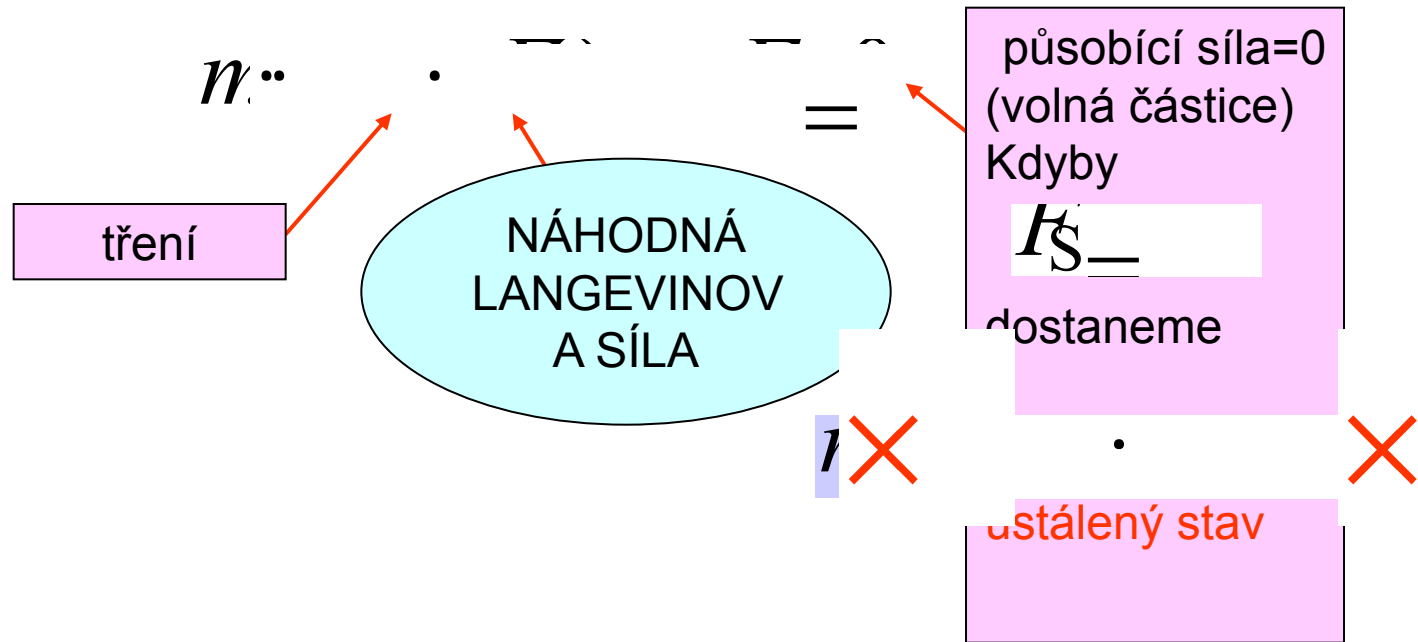
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



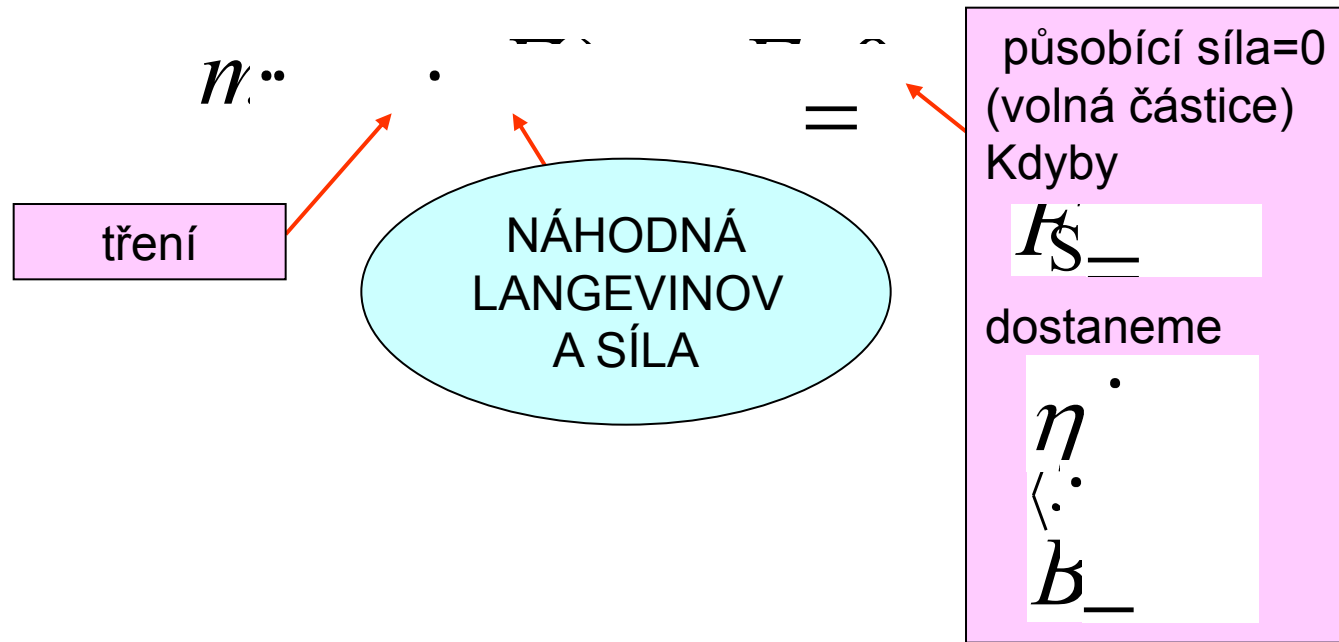
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



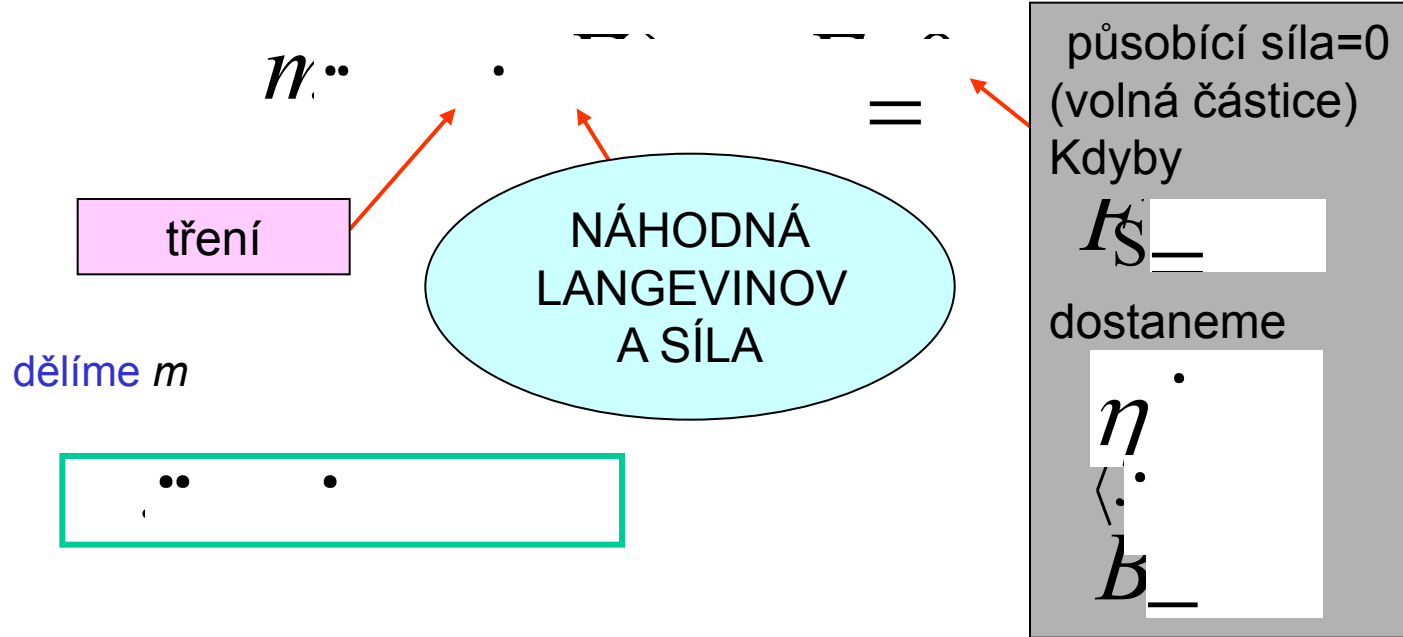
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



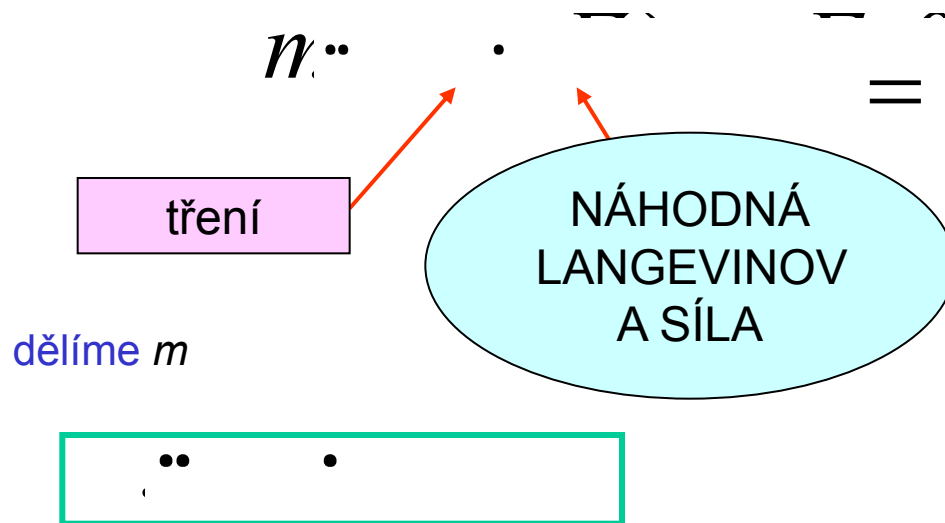
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

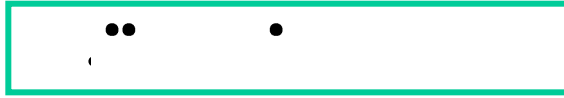


# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Původní Langevinův postup

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



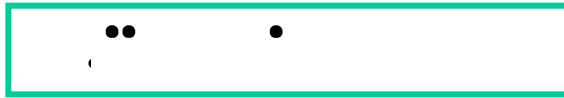
Původní Langevinův postup

1 Středovat ... ale  $c^n$

$$\lambda \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot$$
$$\langle \lambda \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \rangle$$



# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



## Původní Langevinův postup

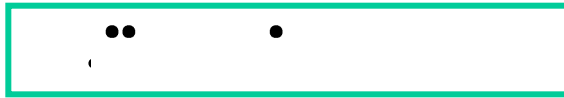
- 1 Středovat ... ale  $\langle x \rangle$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



## Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale  $\langle \dot{x} \rangle = 0$

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

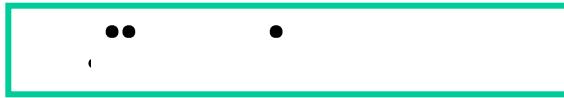
- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



## Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale  $\langle \dot{x} \rangle = 0$

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

$$\langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

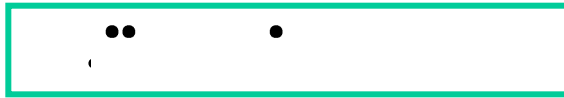
**Motivace**

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

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

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

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



## Původní Langevinův postup

- 1 Středovat ... ale  $\langle \dot{x} \rangle = 0$

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

- 2 Použít ekvipartičního teorému

- 3 Zbavit se náhodné síly !!!

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

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

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{kT}{\gamma}$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

## Pokračování

- 4 Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

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

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

- 5 Počáteční podmínka  $x_0$

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

## Pokračování

- 4 Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle \dot{x} \rangle = -\frac{kT}{\gamma} \frac{1}{L} \left( \frac{1}{2} - \frac{x}{L} \right)$$

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

$$\langle \dot{x} \rangle = -\frac{kT}{\gamma} \frac{1}{L} \left( \frac{1}{2} - \frac{x}{L} \right)$$

- 5 Počáteční podmínka  $x_0$

$$\langle x \rangle = \frac{kT}{\gamma} \frac{1}{L} \left( \frac{1}{2} - \frac{x_0}{L} \right) t + x_0$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

## Pokračování

- 4 Výsledná LODR 1. řádu (nenáhodná)

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

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

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

- 5 Počáteční podmínka  $x_0$

$$\langle \dot{x} \rangle = \dots$$

- 6 Poslední integrace

$$\langle x^2 \rangle = \dots$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right)$$

VÝSLEDEK

♣ Pro  $t \ll \tau$

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right) \approx \dots$$

⇒  $\dots$  **likace**  $\frac{\gamma_B t}{\gamma} \equiv \dots$

**$k_B T = \dots$  ŠTENŮVZTAH**

♣ Pro  $t \gg \tau$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right)$$

**$\dots$  ŠTENŮVZTAH**



# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right)$$

VÝSLEDEK

Pro  $t \ll \tau$

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right) \approx \dots$$

⇒ **flukace**  $\frac{\gamma \tau}{\gamma} \equiv \dots$

$$\epsilon \approx \frac{1}{\gamma} \dots$$

vační dba

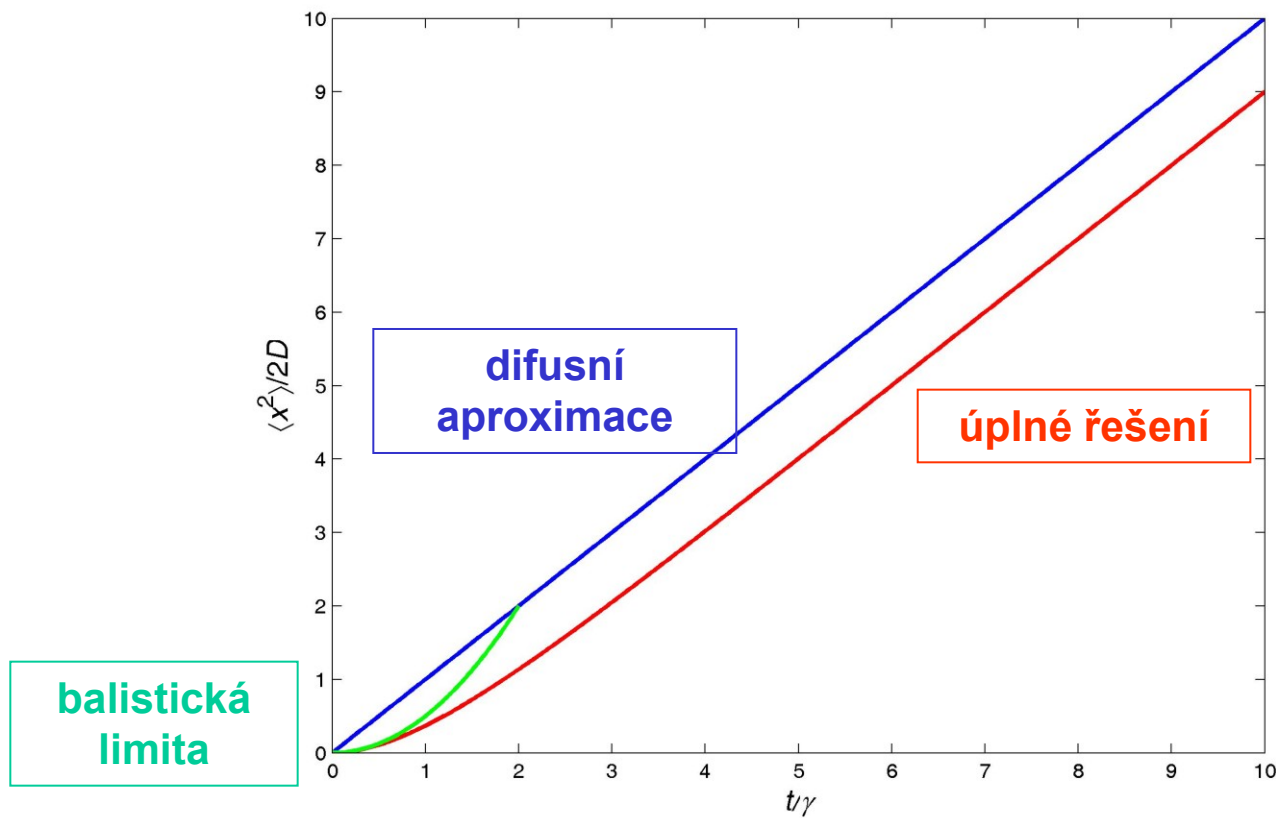
$$\boxed{k_B T} = \dots \text{STEINŮV VZTAH}$$

Pro  $t \gg \tau$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{\gamma} \left( \dots \right)$$

$$\dots \text{STEINŮV VZTAH}$$

# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici

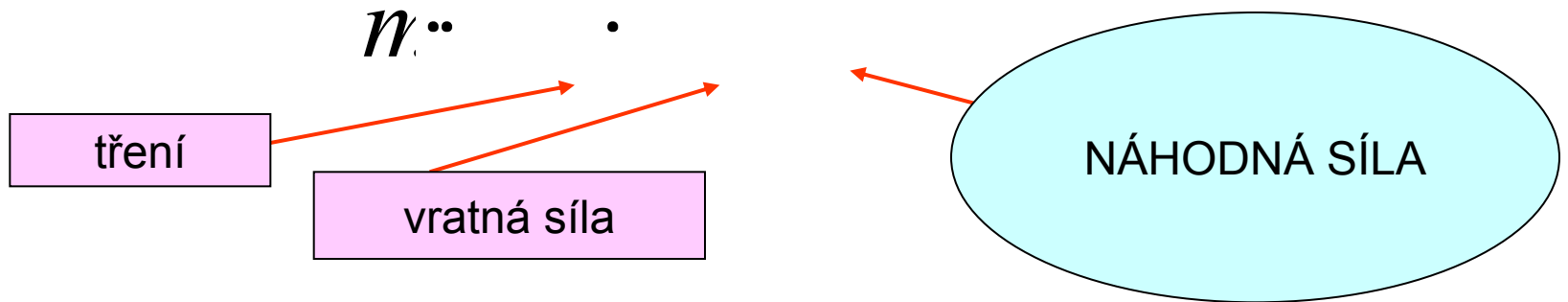


## *Langevinova rovnice II.*

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

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

tlumený lineární oscilátor  
parametry empiricky dostupné

hnán vtištěnou silou  
síla náhodná, Gaussovský bílý šum

středování  $\langle \ddot{x} \rangle = 0$

$$\langle \dot{x} \rangle = 0$$

$$\langle x \rangle + \langle \dot{x} \rangle + \langle \ddot{x} \rangle = 0$$

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

$$x(t) = \dots \cdot [X]_{-\lambda} + \dots \cdot [X]_{-\lambda} + f(t)$$

sekulární rovnice

$$\lambda^2 + \gamma \lambda + \omega^2 = 0$$

$$\lambda = \frac{-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4\omega^2}}{2}$$

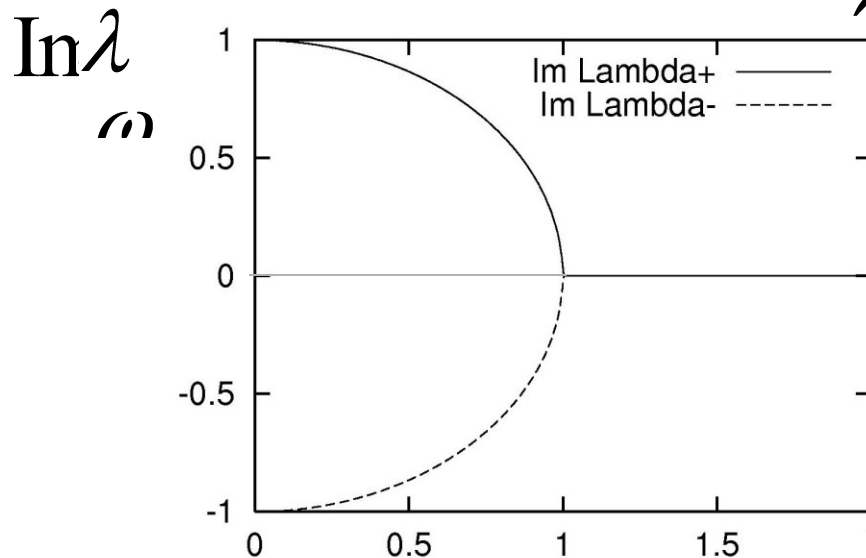
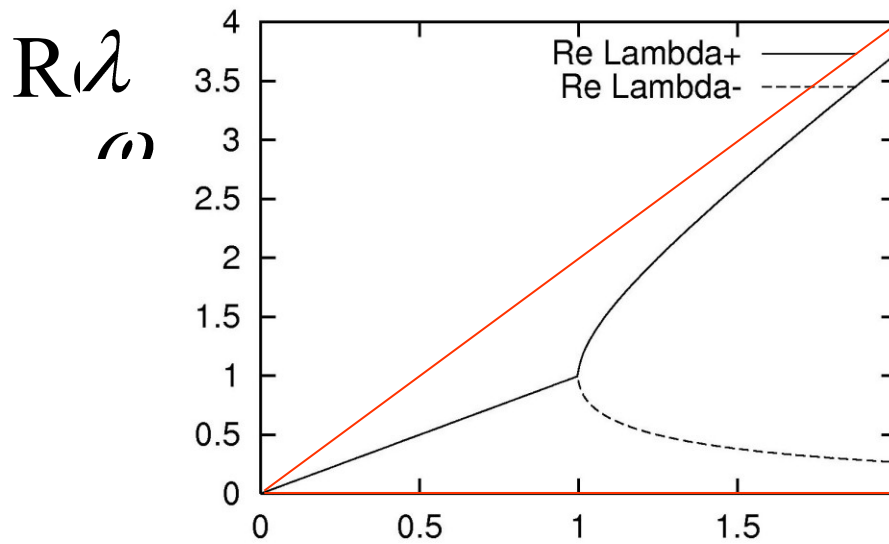
kritická hodnota

podtlumené kmity

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

přetlumené kmity

# Kořeny charakteristické rovnice

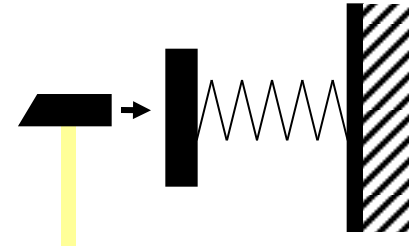


# Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

$$\frac{d^2 Q(t,t')}{dt^2} + \gamma \frac{dQ(t,t')}{dt} + \omega^2 Q(t,t') = \delta(t-t')$$



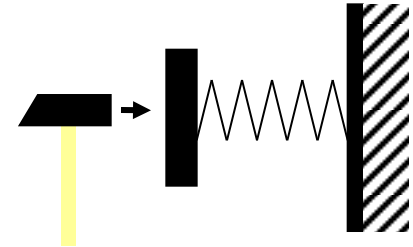
pulsní excitace

# Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

$$\frac{d^2 Q(t, t')}{dt^2} + \gamma \frac{dQ(t, t')}{dt} + \omega^2 Q(t, t') = \delta(t - t')$$



pulsní excitace

PAK

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t') f(t') dt'$$

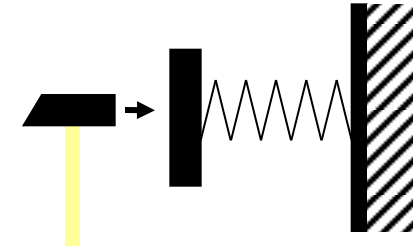


# Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

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



pulsní excitace

PAK

$$x(t) = \int dt' G(t,t') f(t')$$

Ověření:  $LG$

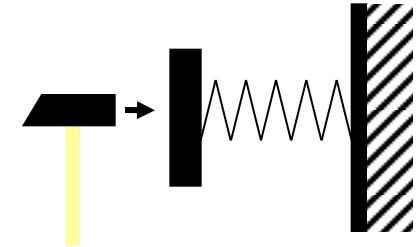
Proto  $L \sim \int$

# Langevinova rovnice – Greenova funkce

partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

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



PAK

$$x(t) = \int_{-\infty}^t G(t,t') f(t') dt'$$

Ověření:  $LG$

Proto  $L \sim \int$

akustická měření  
Greenovy funkce  
podle definice  
s kladívkem

# Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

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

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

B  $\frac{d}{dt} G(t, t') = 0$  pro  $t > t'$

C  $\frac{d}{dt} G(t, t') = 0$  při  $t = t'$

okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

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

# Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

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

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

B  $\frac{d}{dt} G(t, t') = 0$  pro  $t > t'$

C  $G(t, t) = 0$  a  $\frac{d}{dt} G(t, t) = 0$  okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

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

$$G(t, t') = \frac{1}{\lambda} \left[ e^{-\lambda(t-t')} - e^{-\lambda(t-t')} \cdot \mathcal{G} \right]$$

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly



$$\langle f(t)f(t') \rangle =$$

konvenční, ale matoucí  
označení

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly



$$\langle f(t)f(t') \rangle =$$

$\overline{\quad}$   
naše konvenční označení

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly



$$\langle f(t)f(t') \rangle =$$

—

???

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly



$$\langle f(t)f(t') \rangle =$$

$-\quad ???$

Musíme se opřít o ekvipartiční  
teorém

$$\langle x^2(t) \rangle = \iint \dots = \int \dots = \frac{\dots}{\gamma \omega} \quad \text{ýpočet}$$



# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly  $\langle f(t)f(t') \rangle =$

???

Musíme se opřít o ekvipartiční  
teorém

$$\begin{aligned}
 \langle x^2(t) \rangle &= \iint_{-\infty}^{\infty} \dots \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \\
 &= \dots
 \end{aligned}$$

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

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly  $\langle f(t)f(t') \rangle =$

???

Musíme se opřít o ekvipartiční  
teorém

$$\begin{aligned}
 \langle x^2(t) \rangle &= \iint \dots \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \\
 &= \dots
 \end{aligned}$$

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

Výsledek  
(připomíná  
Einsteinův vztah)

$$\frac{\tau}{\gamma} = \dots$$

# Langevinova rovnice – náhodná síla

Velikost náhodné síly  $\langle f(t)f(t') \rangle =$

???

Musíme se opřít o ekvipartiční  
teorém

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \iint \dots \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \\ &= \dots \end{aligned}$$

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

Výsledek  
(připomíná  
Einsteinův vztah)

$$\frac{\tau}{\gamma} =$$

stejný jako pro volnou  
Brownovu částici

# Numerická integrace

formální řešení

$$\begin{aligned} & \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x \\ & \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x \\ & \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x \end{aligned}$$

# Numerická integrace

formální řešení

rovnoměrné dělení intervalu času

$$\begin{aligned} & \approx \sum \\ & \approx \sum \\ & \approx \sum \end{aligned}$$

# Numerická integrace

formální řešení

rovnoměrné dělení intervalu času

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

$$\begin{aligned} & \approx \sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \\ & \approx \sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \\ & \approx \sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \end{aligned}$$

# Numerická integrace

$$\equiv \sum \int$$

$$\approx \sum \int$$

$$\equiv \sum \int$$

formální řešení

rovnoměrné dělení intervalu času

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

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

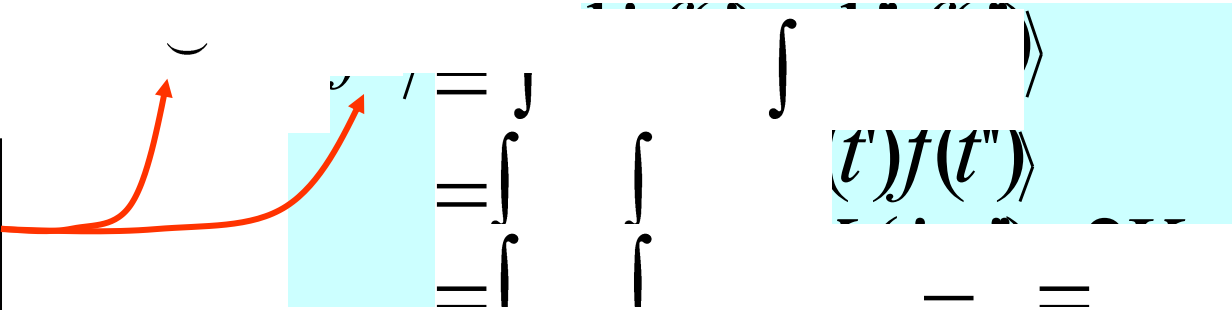
# Numerická integrace

$$\approx \sum \int$$

$$\int$$

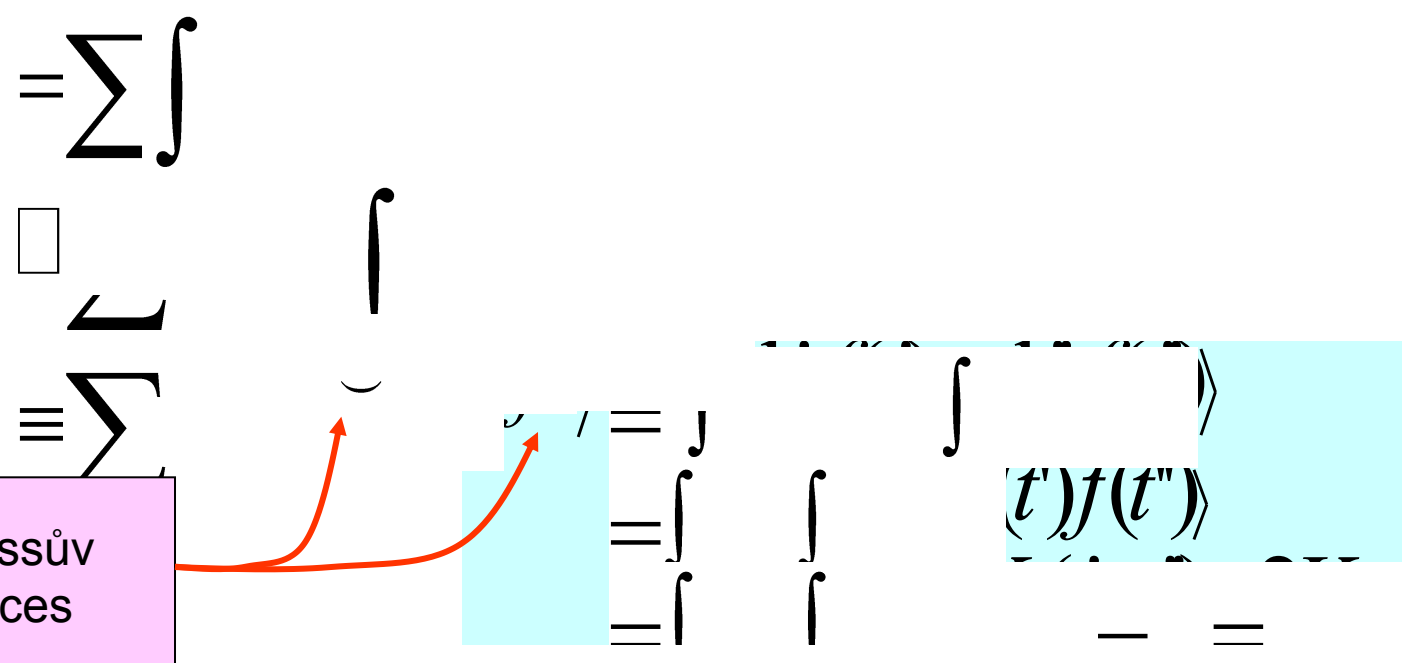
$$\approx \sum \int$$

diskrétní Gaussův  
náhodný proces





# Numerická integrace



diskrétní Gaussův náhodný proces

rozdělení pravděpodobnosti

$$p(X) =$$

$$\left[ \frac{\pi}{\sigma} \right]$$

# Numerická integrace

$$\equiv \sum \int$$



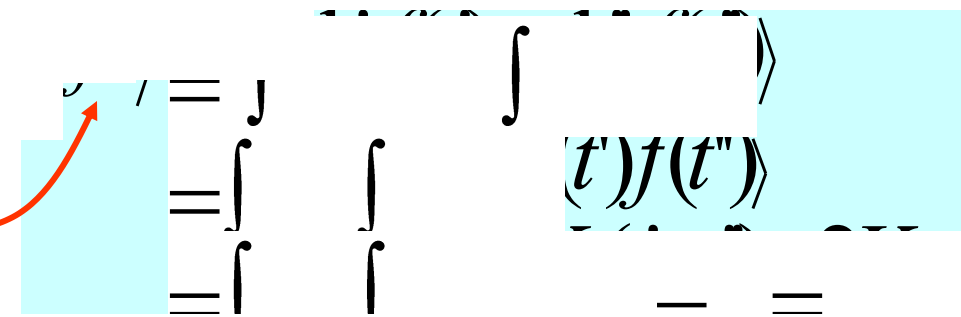
$$\equiv \sum \int$$

diskrétní Gaussův  
náhodný proces

rozdělení  
pravděpodobnosti

$$p(X) =$$

$$\begin{bmatrix} \mu \\ \sigma \end{bmatrix}$$



generují na počítači

# Numerická integrace

$$\equiv \sum \int$$

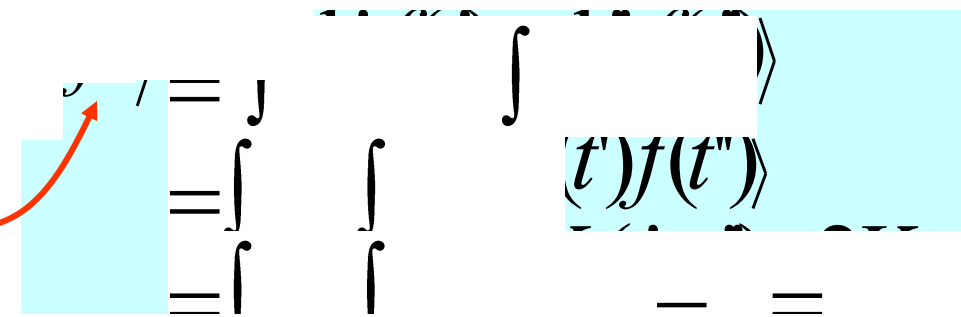


$$\equiv \sum \int$$

diskrétní Gaussův  
náhodný proces

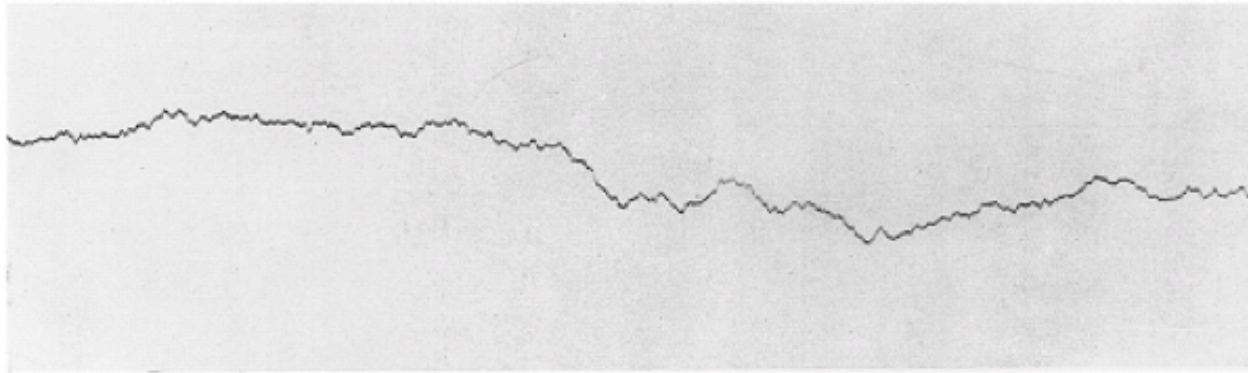
rozdělení  
pravděpodobnosti

$$p(X) =$$



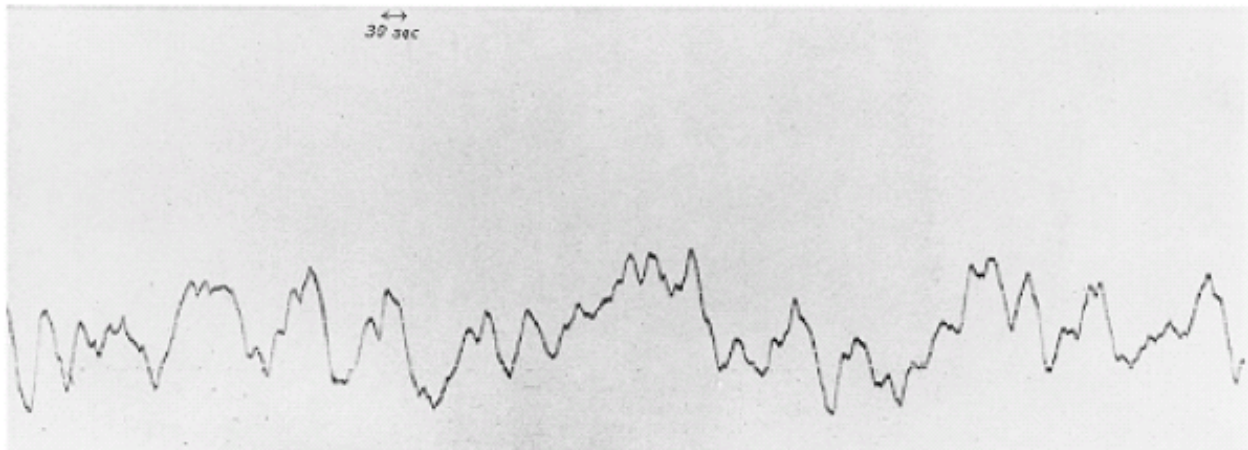
generování na počítači  
pseudonáhodná  
čísla

# 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  $15^{\circ}$  C

Fig. 4a



Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,00 \cdot 10^{-9}$  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  $10^{\circ}$  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  $dx = 2$  mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur  $15^{\circ}$  C

Fig. 4a

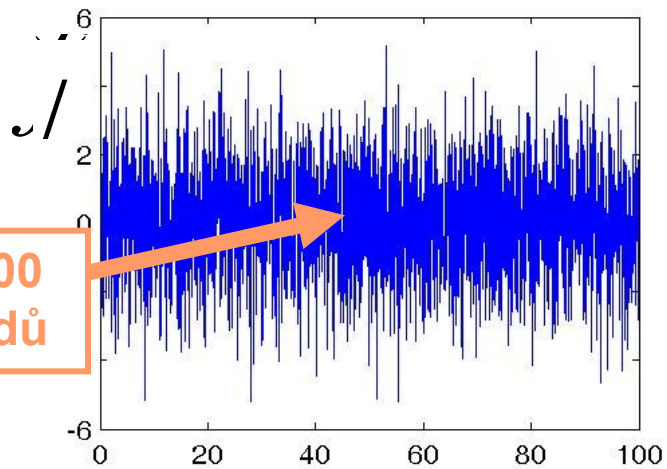
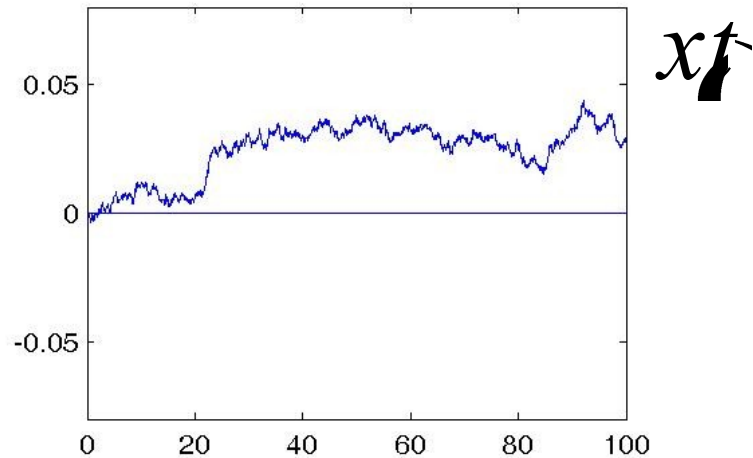
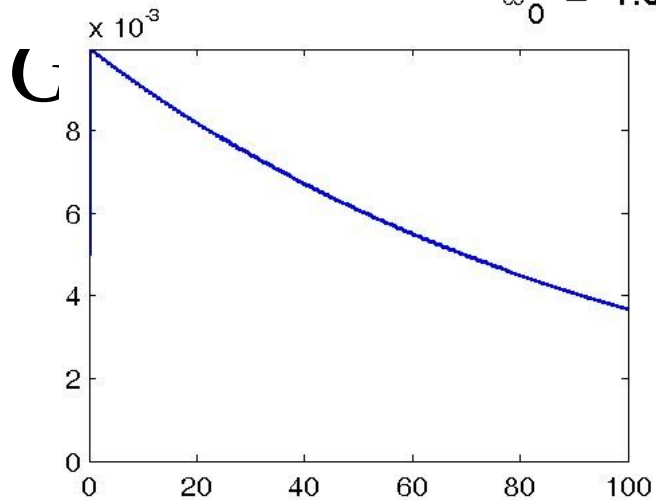


snížený tlak, podtlumený oscilátor

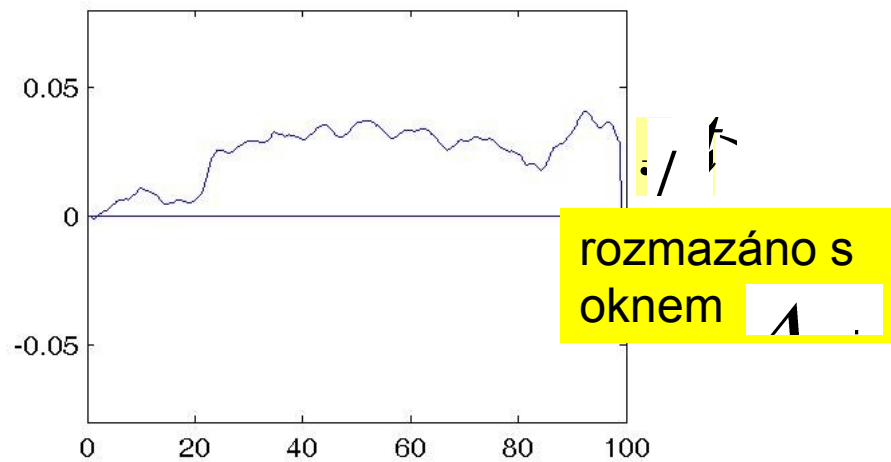
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,00 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.  
Zeitmarke: 30 sec  $dx = 2$  mm. b)  $4 \cdot 10^{-3}$  mm Hg. Temperatur  $10^{\circ}$  C

Fig. 4b

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

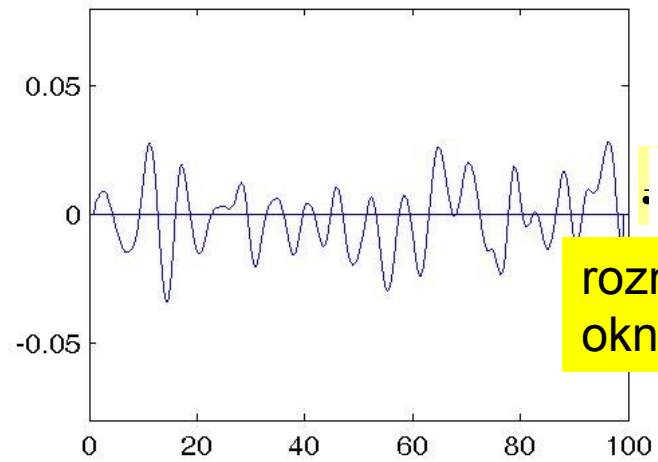
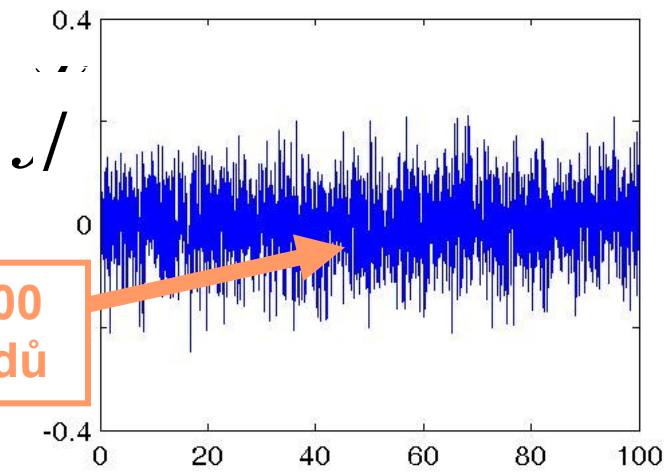
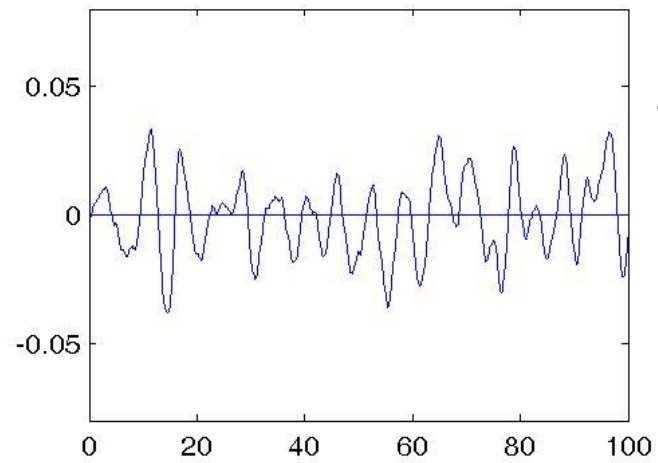
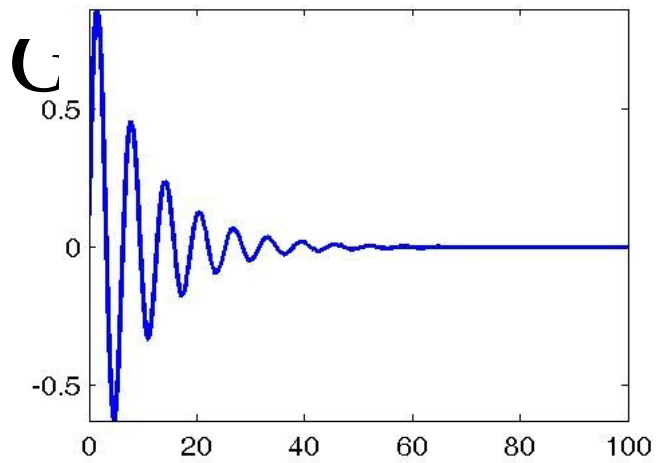


2500  
bodů



→ čas

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



→ čas

*The end*



# Systematický popis termických fluktuací

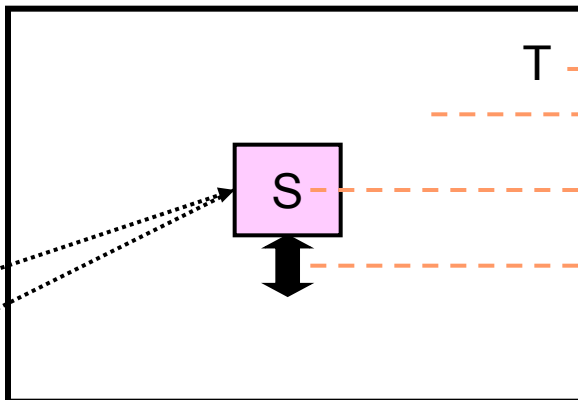
termické fluktuace

kvantové fluktuace

současnost

šum  
noise

## MAKROSKOPICKÁ APARATURA



měřicí  
blok  
není  
součástí  
systému

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

systém mesoskopický

interakce T -- S

$$H_T \otimes \mathbb{1}_S \approx \sum_i T_i \otimes S_i$$

mikroskopické  
stupně volnosti

globální

$$H_T = \sum_i T_i$$

$$H_S = \sum_i S_i \quad \times$$

$$U_{ST} = \dots$$

"silné slabé" ↔ *molekulární chaos*

# Termostat z ideálního plynu

$$H_T = H_T - U_T$$

$$= \underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{2m}}_{\text{kinetická}} + \underbrace{V_C + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta}}_{\text{potenciální}}$$

obecný tvar hamiltoniánu

pro (téměř) ideální plyn

srážky vedou k chaotisaci

podmínky pro dobrý termostat  
z ideálního plynu

$$\frac{a}{\bar{v}} \ll l$$

doba chaotisace (srážková doba)

doba termalisace (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 "molekulu, trochu sice větší, ale jinak zapadající do Boltzmannovy kinetické teorie"

Předpokládáme totiž  $H_{\text{tot}} = \underbrace{\dots}_{\text{"N + 1" molekul}} + \dots$

Škrtnutý člen vyvolá nevratnou dynamiku. Jsou dvě cesty:

- Počítáme střední hodnoty s rozdělovací funkcí

$$J(p, q) \propto \int_{\Gamma} \delta(p, q)$$

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  $\frac{1}{2}A\dot{x}$

Pak

$$\langle \frac{1}{2}A\dot{x}^2 \rangle = \int \frac{\frac{1}{2}A\dot{x}^2 \cdot \frac{dx}{dt}}{\int \frac{1}{2}A\dot{x}^2 \cdot \frac{dx}{dt}} = \frac{1}{2}AT$$

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

