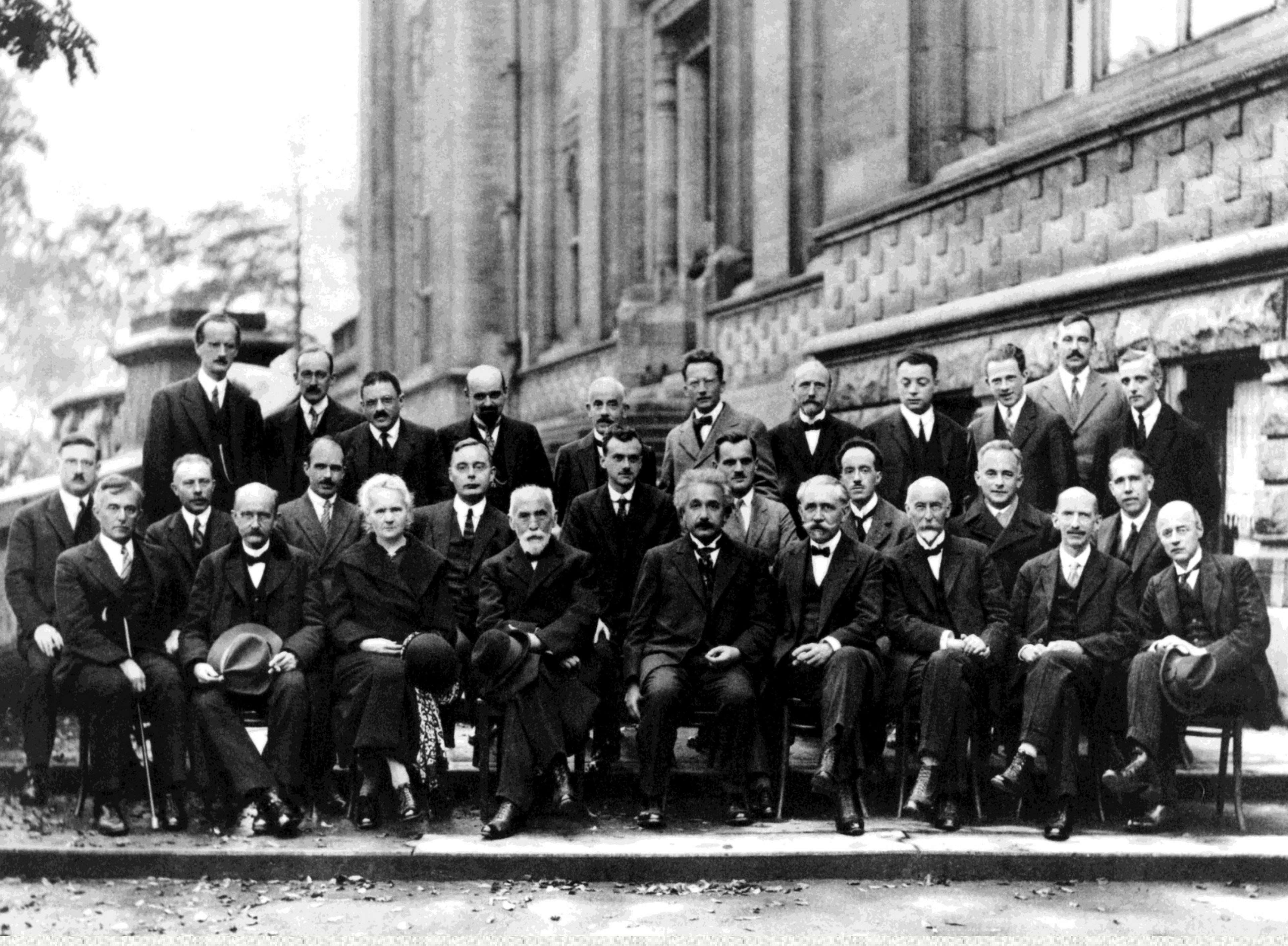
Langevinova rovnica – vzťah trecej a náhodnej sily

Vypracoval: Jakub Bělín

Paul Langevin (1872-1946)

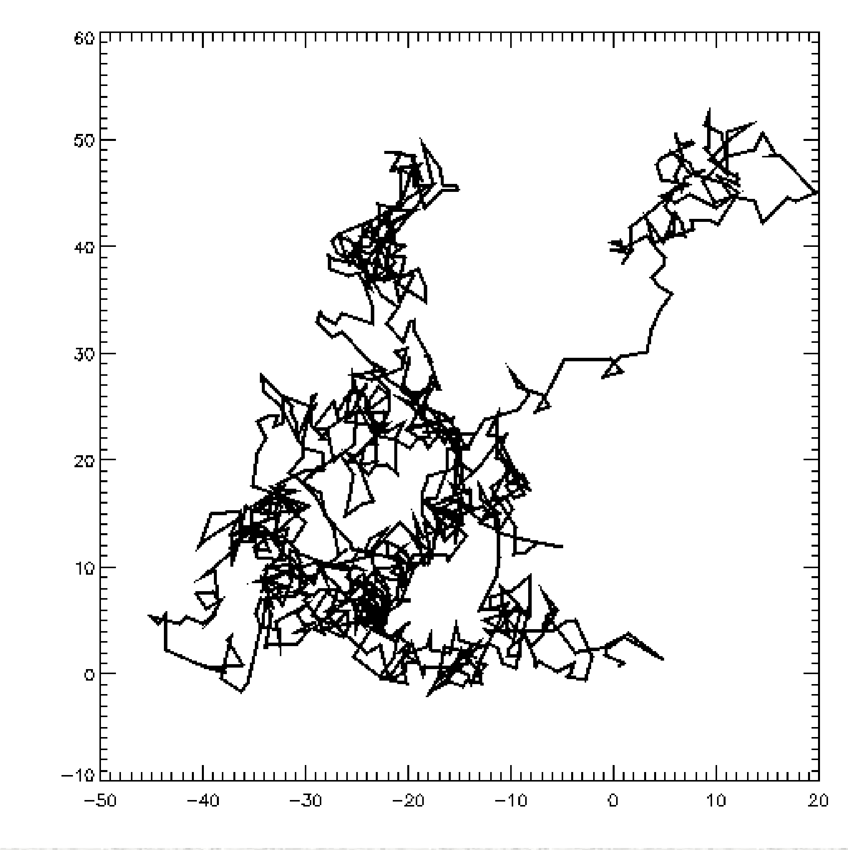
- Francúzsky fyzik
- Člen Parížskej akadémie vied
- Zaoberal sa magnetizmom, ultrazvukom (piezoelektrický efekt)
- Zástanca teórie relativity
- Odporca nacizmu



Langevinova rovnica

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

- Stochastická diferenciálna rovnica
- Dôležitá úloha v nerovnovážnej štatistickej mechanike
- Vznik – popis Brownovho pohybu

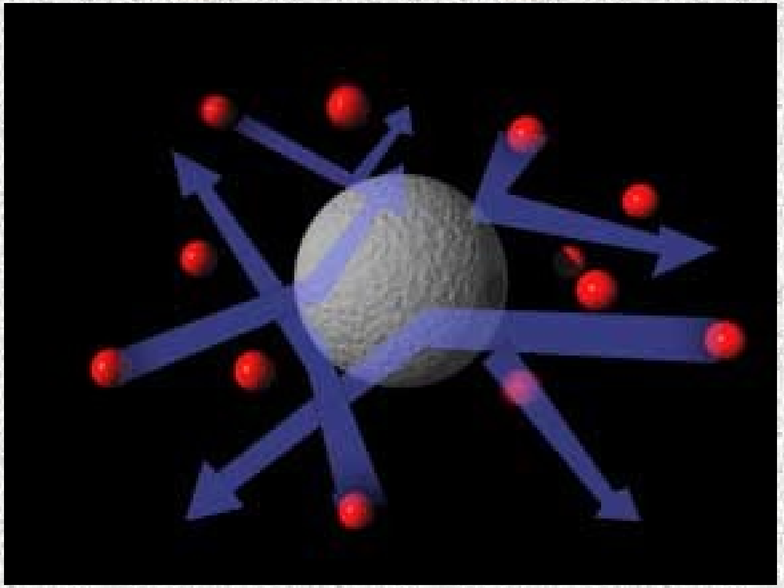


Langevinova rovnica

- Myšlienka: na mesoskopickú časticu pôsobí fluktuujúca sila zo strany molekúl termostatu.
- pre chaotický pohyb mesoskopických častíc môžeme napísať pohybovú rovnicu
- Vyzerá ako mikroskopická, ale nie je – náhodná Langevinova sila je zavedená fenomenologicky

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Uvažujme pohyb častice v látkovom prostredí potom, čo bola uvedená do určitého pohybového stavu.
- V dôsledku trenia s látkou sa častica spomaľuje.
- Pohyb takejto častice je popísaný Langevinovou rovnicou, ktorú teraz odvodíme



Odvodenie Langevinovej rovnice

- Hamiltonán popisujúci časticu pohybujúcu sa po trajektórii *x(t)* a prostredie, v ktorom sa táto častica nachádza:

$$H = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + V(x) + H_b - \int f'(t)dx$$

kde *f'(t)* je fluktuujúca sila, *V(x)* je potenciálna energia častice a H_b je funkcia popisujúca prostredie (nezávislá na *x(t)*).

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Výsledná sila pôsobiaca na časticu je potom:

$$F(t) = -\frac{\partial V}{\partial x} + f'(t)$$

- Predpokladajme, že *f'(t)* je priamo úmerná *x(t)*:

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

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Na predchádzajúcej snímke sa objavila funkcia $\chi_b(t+t')$, v štatistickej mechanike známa ako funkcia odozvy (response function), príp. zobecnená Susceptibilita
- Funkcia odozvy je definovaná predpisom:

$$\chi_b(t-t') = \begin{cases} -\beta \dfrac{dC_b(t-t')}{d(t-t')}, t > t' \\ 0, v\ inom\ prípade \end{cases}$$

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Funkcia odozvy je teda priamo úmerná časovej zmene veľkosti odchýlky fluktuujúcej sily

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

- Korelácia - existencia vzájomnej súvislosti medzi dvoma alebo viacerými dejmi na rôznych miestach priestoru (priestorová korelácia) alebo v rôznych časoch (časová korelácia) (Definícia z Wikipédie)

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Teraz sa môžeme vrátiť k našej pohybovej rovnici
- Pohybová rovnica častice je potom

$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx} + f(t) - \int_{-\infty}^{t} dt'\, \beta \frac{dC_b(t-t')}{d(t-t')} x(t')$$

- Po „malej" úprave získame

$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx} + f(t) + [x(0)\beta C_b(t) - x(t)\beta C_b(0)] - \int_{0}^{t} \beta C_b(t-t')\dot{x}(t')dt'$$

- Táto rovnica sa nazýva **Zobecnená Langevinova rovnica**

Odvodenie Langevinovej rovnice

- Po transformácii do premenných:

$$\bar{V}(x) := V(x) + \frac{1}{2}x^2\beta C_b(0)$$

$$\bar{F}(t) := f(t) + x(0)\beta C_b(t)$$

Langevinova rovnica prejde do tvaru:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial \bar{V}}{\partial x} + \bar{F}(t) - \int_0^t \beta C_b(t-t')\dot{x}(t')dt'$$

Markovova aproximácia

- Rovnica, ktorú sme odvodili, sa však nepodobá na Langevinovu rovnicu, ktorú poznáme a ktorá sa najčastejšie uvádza

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

- Tento tvar získame pomocou tzv. Markovovej aproximácie

Markovova aproximácia

- Zavedieme substitúciu: *t*‘‘ *= t - t*‘
- Predpokladajme, že *t je oveľa dlhší ako relaxačná doba* (C_b(t) = 0)
- potom

$$\frac{\partial x(t-t'')}{\partial (t-t'')} \approx \frac{\partial x(t)}{\partial t}$$

a Langevinova rovnica prejde do tvaru

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial \bar{V}}{\partial x} + f(t) - \int_0^\infty \beta C_b(t'')\dot{x}(t)dt''$$

Markovova aproximácia

- Keď platí

$$-\partial\bar{V}/\partial x = 0$$

- A keď označíme

$$\gamma = \beta \int_0^\infty C_b(t'')dt''$$

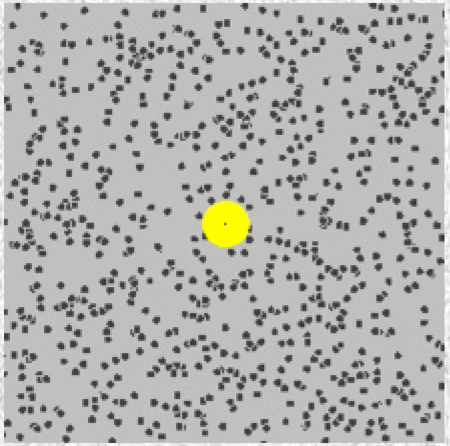
- Tak získame tvar Langevinovej rovnice taký, aký poznáme

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

Markovova aproximácia

- Markovova aproximácia teda zahrňuje predpoklad, že relaxačný čas fluktuujúcich síl je oveľa kratší než čas, počas ktorého pozorujeme časticu
- Taktiež maže „pamäťové efekty“ z pohybovej rovnice (okamžitá sila je nezávislá na predchádzajúcom stave častice)

Ďakujem za pozornosť



Referencie

- http://en.wikipedia.org/wiki/Langevin_equation
- http://en.wikipedia.org/wiki/Paul_Langevin
- http://xbeams.chem.yale.edu/~batista/vaa/
- Študijné materiály k predmetu **F4110 Kvantová fyzika atomárních soustav**