8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

VIII. Kayıplı Dinamik

VIII.A Bir Parçacığın Brown Hareketi

Mikroskop altında incelemeler, bir sıvı damlasındaki toz parçacığının rastgele titrek bir hareket yaptığını gösterir. Bunun sebebi çok daha küçük sıvı parçacıklarının rastgele çarpmasıdır. Bu tarz hareketin (Brown hareketi) kuramı, 1905 yılında Einstein tarafından geliştirilmiştir, ve bir parçacığın hareket denkleminden başlar. m kütleli bir parçacığın yer değiştirmesi $\vec{x}(t)$

$$m\ddot{\vec{x}} = -\frac{\dot{\vec{x}}}{\mu} - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \vec{x}} + \vec{f}_{rastgele}(t) \tag{VIII.1}$$

tarafından belirlenir. Parçacığa etki eden üç kuvvet:

(i) Sıvının ağdalılığından kaynaklı sürtünme kuvveti. R yarıçaplı küresel bir parçacık için, düşük Reynolds sayısı limitindeki hareketliliği $\mu = (6\pi\bar{\eta}R)^{-1}$ ile verilir, burada $\bar{\eta}$ belirli ağdalılıktır.

(ii) Harici potansiyel $\mathcal{V}(\vec{x})$, mesela kütle çekimi, kaynaklı kuvvet.

(iii) Ortalaması sıfır olan, sıvı parçacıklarının çarpmasından kaynaklı rastgele kuvvet.

Ağdalılık terimi, genelde, eylemsiz olana baskındır (yani hareket aşırı sönümlüdür), ve bundan sonra, ivme terimini ihmal edeceğiz. Bu durumda, denklem VIII.1, bir *Langevin denklemi*ne dönüşür:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{v}(\vec{x}) + \vec{\eta}(t) \tag{VIII.2}$$

burada $\vec{v}(\vec{x}) = -\mu\partial\mathcal{V}/\partial\vec{x}$, *deterministik* hızdır. *Rastgele* hızın, $\vec{\eta}(t) = \mu\vec{f}_{\text{rastgele}}$ ortalaması sıfırdır

$$\langle\vec{\eta}(t)\rangle = 0 \tag{VIII.3}$$

Genelde, hızdaki gürültü için olasılık dağılımının Gaussiyan olduğu varsayılır, yani

$$\mathcal{P}\left[\vec{\eta}(t)\right] \propto \exp\left[-\int d\tau \frac{\eta(\tau)^2}{4D}\right] \tag{VIII.4}$$

Gürültünün farklı bileşenlerinin, ve farklı zamanlarda bağımsız olduğuna, ve eşdeğişkesinin

$$\langle\eta_\alpha(t)\eta_\beta(t')\rangle = 2D\delta_{\alpha,\beta}\delta(t-t') \tag{VIII.5}$$

olduğuna dikkat edin.

D parametresi, parçacıkların sıvı içerisinde *dağılma*sıyla ilgilidir. Herhangi bir potansiyelin yokluğunda, $\mathcal{V}(\vec{x}) = 0$, herhangi bir parçacığın t anındaki konumu

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) + \int_0^t d\tau \vec{\eta}(\tau)$$

ile verilir. Açıkça, $\vec{x}(t) - \vec{x}(0)$ ayrımının, ki rastgele Gaussiyan değişkenlerin toplamıdır, kendisi de ortalaması sıfır olan, Gaussiyan dağılımlı bir değişkendir, ve değişkesi

$$\left\langle (\vec{x}(t) - \vec{x}(0))^2 \right\rangle = \int_0^t d\tau_1 d\tau_2 \langle \vec{\eta}(\tau_1) \cdot \vec{\eta}(\tau_2) \rangle = 3 \times 2DT$$

olarak verilir. $\vec{x}(t) = 0$'da, yani $\mathcal{P}(\vec{x}, t = 0) = \delta^3(\vec{x})$, bırakılan bir parçacık topluluğu için, t zamanında parçacıklar

$$\mathcal{P}(\vec{x}, t) = \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \right)^{3/2} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt} \right]$$

ile dağılırlar, ki bu dağılım

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = D \nabla^2 \mathcal{P}$$

dağılma denkleminin çözümüdür

Basit bir örnek, $\mathcal{V}(\vec{x}) = Kx^2/2$ olan Hook yayına bağlanmış bir parçacıktır. Şimdi, deterministik hız $\vec{v}(\vec{x}) = -\mu K \vec{x}$ ile verilir, ve Langevin denklemi $\dot{\vec{x}} = -\mu K \vec{x} + \vec{\eta}(t)$,

$$\frac{d}{dt}\left[e^{\mu K t} \vec{x}(t) \right] = e^{\mu K t} \vec{\eta}(t) \tag{VIII.6}$$

şeklinde yeniden düzenlenebilir. Denklemin 0'dan t'ye kadar integrali

$$e^{\mu K t} \vec{x}(t) - \vec{x}(0) = \int_0^t d\tau e^{\mu K \tau} \vec{\eta}(\tau) \tag{VIII.7}$$

verir, ve

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) e^{-\mu K t} + \int_0^t d\tau e^{-\mu K (t-\tau)} \vec{\eta}(\tau) \tag{VIII.8}$$

Gürültü üzerinden ortalamasını almak, ortalama konumun

$$\langle \vec{x}(t) \rangle = \vec{x}(0) e^{-\mu K t} \tag{VIII.9}$$

$\tau = 1/(\mu K)$ karakteristik *gevşeme süresi* ile azaldığını gösterir. Ortalama etrafındaki salınımlar,

$$\begin{aligned} \left\langle (\vec{x}(t) - \langle \vec{x}(t) \rangle)^2 \right\rangle &= \int_0^t d\tau_1 d\tau_2 e^{-\mu K (2t - \tau_1 - \tau_2)} \overbrace{\langle \vec{\eta}(\tau_1) \cdot \vec{\eta}(\tau_2) \rangle}^{2D\delta(\tau_1 - \tau_2) \times 3} \\ &= 6D \int_0^t d\tau e^{-2\mu K (t-\tau)} \end{aligned}$$

$$= \frac{3D}{\mu K}\left[1-e^{-2\mu K t}\right] \quad \overset{t\to\infty}{\longrightarrow} \quad \frac{3D}{\mu K} \tag{VIII.10}$$

gibi davranır. Ancak, toz zerreleri T sıcaklığındaki sıvıyla dengeye ulaştıklarında, olasılık dağılımı, birimleştirilmiş Boltzman ağırlığını sağlamalıdır

$$\mathcal{P}_{\text{denge}}(\vec{x}) = \left(\frac{K}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{Kx^2}{2k_B T}\right] \tag{VIII.11}$$

ki $\langle x^2 \rangle = 3k_B T/K$ verir. Dinamiklerin, parçacığı T sıcaklığındaki sıvıyla dengeye getirmesi beklendiğinden, denklem VIII.10

$$D = k_B T \mu \tag{VIII.12}$$

olduğunu ifade eder. Bu, gürültüdeki *salınımları*, ortamdaki *kayıp*la bağlayan Einstein bağıntısıdır. Açıkça, uzun zamanlarda Langevin denklemi, T sıcaklığında, $\mathcal{V}(\vec{x}) = Kx^2/2$ pontasiyeli içinde dengedeki bir parçacık için doğru ortalama ve değişkeyi verir, eğer denklem VIII.12 sağlanırsa. Herhangi bir potansiyel için, bütün olasılık dağılımının Boltzmann ağırlığına evrimleşeceğini gösterebilir miyiz? $\mathcal{P}(\vec{x},t) \equiv \langle \vec{x} \mid \mathcal{P}(t) \mid 0 \rangle$, bir parçacık, $t = 0$ anında 0'daysa, parçacığı, t anında $\vec{x}$ noktasında bulma olasılığını versin. Bu olasılık, $t+\epsilon$ zamanında $\vec{x}$'de bulunan parçacığın, t anında bir başka $\vec{x}'$ noktasından geldiğine dikkat ederek, yinelemeyle oluşturulabilir. Bu tarz bütün olasılıkları ekleyerek

$$\mathcal{P}(\vec{x}, t+\epsilon) = \int d^3\vec{x}' \mathcal{P}(\vec{x}', t) \langle \vec{x} \mid T_\epsilon \mid \vec{x}' \rangle \tag{VIII.13}$$

elde edilir, burada $\langle \vec{x} \mid T_\epsilon \mid \vec{x}' \rangle \equiv \langle \vec{x} \mid \mathcal{P}(\epsilon) \mid \vec{x}' \rangle$ geçiş olasılığıdır. $\epsilon \ll 1$ için,

$$\vec{x} = \vec{x}' + \vec{v}(\vec{x}')\epsilon + \vec{\eta}_\epsilon \tag{VIII.14}$$

burada $\vec{\eta}_\epsilon = \int_t^{t+\epsilon} d\tau \vec{\eta}(\tau)$. Açıkça, $\langle \vec{\eta}_\epsilon \rangle = 0$ ve $\langle \eta_\epsilon^2 \rangle = 2D\epsilon \times 3$, ve denklem VIII.4'ü takip ederek,

$$p(\vec{\eta}_\epsilon) = \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\eta_\epsilon^2}{4D\epsilon}\right] \tag{VIII.15}$$

Geçiş hızı, denklem VIII.14'e göre, sadece doğru genlikte bir gürültü bulma olasılığır, ve

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \mid T(\epsilon) \mid \vec{x}' \rangle &= p(\eta_\epsilon) = \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{x}-\vec{x}'-\epsilon\vec{v}(\vec{x}'))^2}{4D\epsilon}\right] \\ &= \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left[-\epsilon\frac{\left(\dot{\vec{x}}-\vec{v}(\vec{x})\right)^2}{4D}\right] \end{aligned} \tag{VIII.16}$$

t zaman aralığının, ϵ boyutunda çok küçük parçalara bölerek, yukarıdaki evrim operatörünü tekrar tekrar uygulayarak

$$\mathcal{P}(\vec{x}, t) = \left\langle \vec{x} \middle| T(\epsilon)^{t/\epsilon} \middle| 0 \right\rangle$$

$$= \int_{(0,0)}^{(\vec{x},t)} \frac{\mathcal{D}\vec{x}(\tau)}{\mathcal{N}} \exp\left[-\int_0^t d\tau \frac{\left(\dot{\vec{x}} - \vec{v}(\vec{x})\right)^2}{4D}\right] \tag{VIII.17}$$

elde ederiz. İntegral, başlangıç ve bitiş noktalarını birbirine bağlayan bütün yollar üzerindendir; her yolun ağırlığı, klasik yörüngeden, $\dot{\vec{x}} = \vec{v}(\vec{x})$, ne kadar saptığıyla ilişkilidir. Yineleme bağıntısı (denklem VIII.13),

$$\mathcal{P}(\vec{x},t) = \int d^3\vec{x}' \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{x} - \vec{x}' - \epsilon\vec{v}(\vec{x}'))^2}{4D\epsilon}\right] \mathcal{P}(\vec{x}', t-\epsilon), \tag{VIII.18}$$

$$\begin{aligned} \vec{y} &= \vec{x}' + \epsilon\vec{v}(\vec{x}') - \vec{x} \quad \Longrightarrow \\ d^3y &= d^3\vec{x}'(1 + \epsilon\nabla\cdot\vec{v}(\vec{x}')) = d^3\vec{x}'(1 + \epsilon\nabla\cdot\vec{v}(\vec{x}) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned} \tag{VIII.19}$$

değişken değişikliği ile sadeleştirilebilir. Sadece ϵ mertebesindeki terimleri tutarak

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\vec{x},t) &= [1 - \epsilon\nabla\cdot\vec{v}(\vec{x})] \int d^3y \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} e^{-\frac{y^2}{4D\epsilon}} \mathcal{P}(\vec{x} + \vec{y} - \epsilon\vec{v}(\vec{x}), t-\epsilon) \\ &= [1 - \epsilon\nabla\cdot\vec{v}(\vec{x})] \int d^3y \left(\frac{1}{4\pi D\epsilon}\right)^{3/2} e^{-\frac{y^2}{4D\epsilon}} \times \\ & \left[\mathcal{P}(\vec{x},t) + (\vec{y} - \epsilon\vec{v}(\vec{x}))\cdot\nabla\mathcal{P} + \frac{y_i y_j - 2\epsilon y_i v_j + \epsilon^2 v_i v_j}{2}\nabla_i\nabla_j\mathcal{P} - \epsilon\frac{\partial P}{\partial t} + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right] \\ &= [1 - \epsilon\nabla\cdot\vec{v}(\vec{x})] \left[\mathcal{P} - \epsilon\vec{v}\cdot\nabla + \epsilon D\nabla^2\mathcal{P} - \epsilon\frac{\partial P}{\partial t} + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right] \end{aligned} \tag{VIII.20}$$

elde ederiz. ϵ mertebesindeki terimleri eşitleyerek, *Fokker-Planck denklemi*ni elde ediriz:

$$\frac{\partial\mathcal{P}}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{J} = 0, \quad \vec{J} = \vec{v}\mathcal{P} - D\nabla\mathcal{P} \text{ olmak üzere} \tag{VIII.21}$$

Fokker-Planck denklemi, basitçe, olasılığın korunumunun ifadesidir. Olasılık akımının, deterministik bir bileşeni $\vec{v}\mathcal{P}$ ve rastgele bir bileşeni $-D\nabla\mathcal{P}$ vardır. *Durağan dağılım*, $\partial\mathcal{P}/\partial t = 0$, eğer net akım yok olursa elde edilir. Artık, Boltzman ağırlığının, $\mathcal{P}_{\text{denge}}(\vec{x}) \propto \exp\left[-\mathcal{V}(\vec{x})/k_BT\right]$, $\nabla\mathcal{P}_{\text{denge}} = \vec{v}\mathcal{P}_{\text{denge}}/(\mu k_BT)$ olmak üzere, denklem VIII.12'deki salınım-kayıp koşulu sağlandığı sürece, durağan duruma gideceğini kontrol etmek kolaydır.