Papildomi fizikinės kinetikos uždaviniai (teoretikams)

1. (Elementari tikimybių teorija)

   a) Tegul atsitiktinių dydžių X ir Y vidurkiai lygūs nuliui, $\langle x\rangle = 0, \langle y\rangle = 0$. Įrodykite, kad koreliacijos koeficiento K vertės tenkina nelygybes:

$$-1 \le K \le 1, \quad K = \frac{\langle xy\rangle}{\sqrt{\langle x^2\rangle\langle y^2\rangle}}$$

   b) Panaudojus Stirlingo formulę

$$n! \approx \sqrt{2\pi n}\; n^n e^{-n}, \qquad (n >> 1)$$

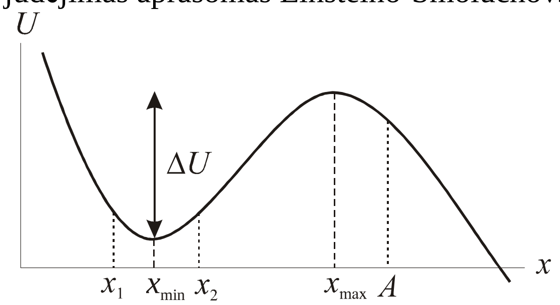
   įrodykite, kad binomonis skirstinys

$$P_N(n_1) = \frac{N!}{(N-n_1)!\,n_1!}\, p^{n_1} q^{N-n_1}, \quad (p+q=1)$$

   riboje $N \to \infty$ pereina į Gauso skirstinį

$$P_N(n_1) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\;\sigma} e^{-\frac{(n_1-\langle n_1\rangle)}{2\sigma^2}}, \quad \langle n_1\rangle = pN, \quad \sigma^2 = \langle n_1^2\rangle - \langle n_1\rangle^2 = pqN.$$

2. (Difundavimas per potencialinį barjerą: Kramerso formulė) Šio uždavinio tikslas – išvesti Kramerso formulę, kuri nusako charakteringą dalelių difundavimo laiką per potencialinį barjerą, kai barjero aukštis ΔU yra žymiai didesnis už dalelių šiluminę energiją kT. Dalelių judėjimas aprašomas Einšteino-Smoluchovskio lygtimi.



$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}, \quad J = nv - D\frac{\partial n}{\partial x},$$

$$v = \mu F = \frac{F}{m\gamma}, \quad \mu = \frac{1}{m\gamma}, \quad F = -\frac{\partial U}{\partial x} \equiv -U'(x), \quad D = \mu kT\ ,$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu\frac{\partial}{\partial x}\left\{nU'(x) + kT\frac{\partial n}{\partial x}\right\}.$$

   a) Kai $kT << \Delta U$ dalelių tankio kitimas duobėje yra labai lėtas $\partial n/\partial t \approx 0$ (kvazistacionarus). Todėl dalelių srautas beveik nepriklauso nuo x: $J \approx const(x)$,

$$J = \mu\left\{nU'(x) + kT\frac{\partial n}{\partial x}\right\} = const(x).$$

Užrašykite srauto išraišką pavidalu

$$J=\Phi_1(x)\frac{\partial}{\partial x}\Phi_2(x).$$

Čia $\Phi_1(x)$ ir $\Phi_2(x)$ yra paprastos funkcijos, nesudarytos iš kitų funkcijų sumos.

b) Perrašykite pastarąją lygybę pavidalu

$$\frac{\partial}{\partial x}\Phi_2(x)=J\,\Phi_1^{-1}(x),$$

suintegruokite ją intervale $[x_{\min}, A]$ ir suraskite ryšį tarp J ir $n(x_{\min})$. Pasirinkite A pakankamai toli nuo $x_{\max}$ taip, kad $n(A)\approx 0$.

c) Esant aukštam barjerui, dalelių srautas pro jį yra mažas ir todėl galima tarti, kad koncentracija duobėje tenkina pusiausvyrinį Boltzmano pasiskirstymą

$$n(x)=n(x_{\min})\exp\left(-\frac{U(x)-U(x_{\min})}{kT}\right)$$

Suintegruokite šią išraišką intervale $[x_1, x_2]$ ($x_1<x_{\min}<x_2$) ir nustatykite dalelių skaičių duobėje

$$N=\int_{x_1}^{x_2}dx\,n(x).$$

Tariame, kad intervalas $[x_1, x_2]$ apima pakankamai didelę sritį ties $x_{\min}$.

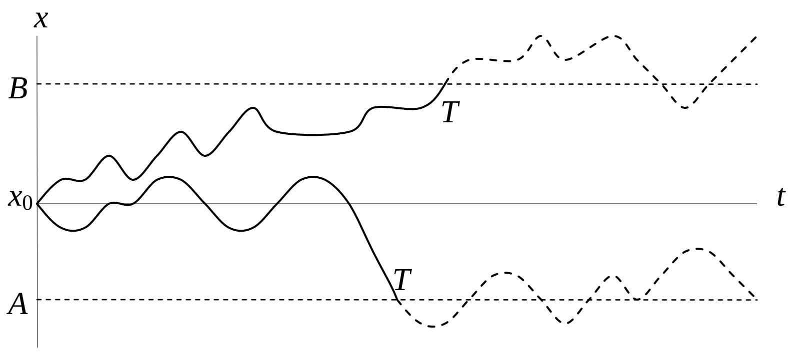
d) Žinant J ir dalelių skaičių N duobėje galima apskaičiuoti jų charakteringą išdifundavimo laiką $\tau_K=N/J$. Užrašykite šį laiką išreikštiniu pavidalu per atitinkamus integralus.

e) Tariant, kad $kT\ll\Delta U$ apytiksliai apskaičiuokite integralus ir gaukite analizinę τ_K išraišką (Kramerso formulę).

3. [Vidutinis pirmo išėjimo laikas (mean first passage time)] Tarkime, kad Brauno dalelė juda potenciniame lauke $U(x)$. Jos perėjimo tikimybė tenkina Einšteino-Smoluchovskio lygtį

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x_0,t_0|x,t)=\hat{L}(x)P(x_0,t_0|x,t),\quad \hat{L}(x)=\frac{\partial}{\partial x}\left\{\mu U'(x)+D\frac{\partial}{\partial x}\right\}$$

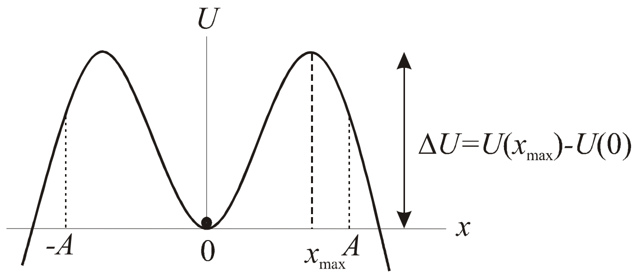
su pradine sąlyga $P(x_0,t_0|x,t_0)=\delta(x-x_0)$. Tegul pradinė dalelės koordinatė x_0 yra intervale $A<x_0<B$. Gaukite lygtį, kuri nusako vidutinį laiką per kurį dalelė pirmą kartą išeina iš intervalo $[A, B]$. Taip pat užrašykite lygtis iš kurių galima nustatyti $\langle T^n\rangle$ momentus (nepainiokite laiko T su temperatūra, kuri žymima ta pačia raide).



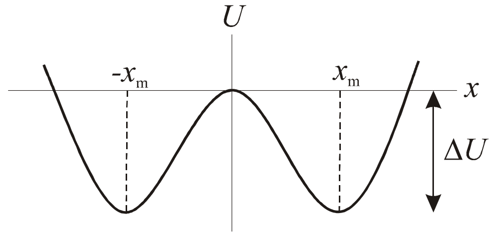
4. Panaudojus praeito (3) uždavinio teoriją, apskaičiuokite laisvos Brauno dalelės vidutinį pirmo išėjimo laiką $\langle T \rangle$ iš intervalo [-*A*, *B*], (*A*>0, *B*>0), kai pradiniu laiko momentu t_0=0 dalelė yra koordinačių pradžioje x_0=0. Laisvos dalelės perėjimo tikimybė aprašoma difuzijos lygtimi
$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_0, t_0 | x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x_0, t_0 | x, t), \quad P(x_0, t_0 | x, t_0) = \delta(x_0 - x).$$
Tarkite, kad *B*=*A* ir nustatykite pirmo išėjimo laiko iš intervalo [-*A*, *A*] standartinį nuokrypį $\sigma = \sqrt{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}$.

5. Apskaičiuokite laisvos Brauno dalelės pirmo išėjimo laiko tikimybės tankio funkciją $f(T)$, iš intervalo [-*A*, *A*], kai pradiniu laiko momentu t_0=0 dalelė yra koordinačių pradžioje x_0=0. Laisvos dalelės perėjimo tikimybė aprašoma difuzijos lygtimi
$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_0, t_0 | x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x_0, t_0 | x, t), \quad P(x_0, t_0 | x, t_0) = \delta(x_0 - x).$$
Nustatykite tikimiausią pirmo išėjimo laiką.

6. Panaudojus (3) uždavinio teoriją, apskaičiuokite Brauno dalelės vidutinį pirmo išėjimo laiką $\langle T \rangle$ iš intervalo [-*A*, *A*], kai ji juda simetriniame potencialiniame lauke, pavaizduotame paveiksliuke. Pradiniu laiko momentu t_0=0 dalelė yra koordinačių pradžioje x_0=0. Tariant, kad $kT \ll \Delta U$ gaukite analizinę $\langle T \rangle$ išraišką ir palyginkite ją su Kramerso formule.



7. [Stochastinis rezonansas (SR)] Paprastai manoma, kad triukšmas yra neigiamas faktorius, kai reikia detektuoti arba perduoti silpnus periodinius (informacinius) signalus. Tačiau tam tikrose netiesinėse sistemose triukšmas gali atlikti teigiamą vaidmenį. Silpną periodinį signalą galima pastiprini padidinus triukšmo intensyvumą (arba pridėjus papildomą triukšmą). Egzistuoja optimalus triukšmo intensyvumas, kuriam esant periodinio signalo amplitudė yra didžiausia. Toks reiškinys vadinamas SR. Klasikinis SR modelis aprašo mažos dalelės judėjimą dvislėniame potenciale $U(x)$ (žr. pav.), kai ją veikia periodinė jėga $A\cos(\Omega t)$ ir triukšmas $F_L(t)$ (Lanževeno jėga).



$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = -\frac{dU}{dx} + A\cos(\Omega t) + F_L(t)$$

Mažos masės daleliai galima išbraukti inercijos narį ir Lanževeno lygtį užrašyti taip:

$$\dot{x} = -\frac{1}{m\gamma}\frac{d}{dx}\left[U(x) - Ax\cos(\Omega t)\right] + \xi(t).$$

Čia $\xi(t) = F_L(t)/m\gamma$ yra Lanževeno šaltinis, kuriam galioja tokie postulatai:

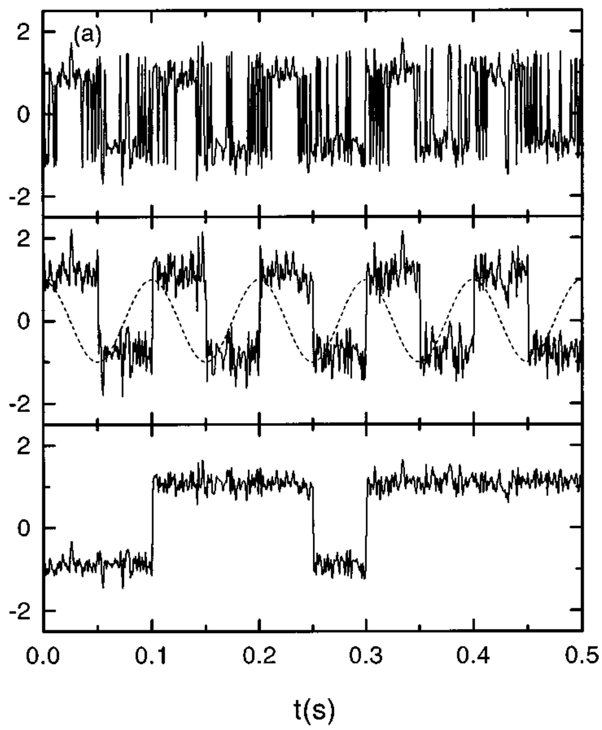
$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t - t').$$

Čia pasinaudota fluktuaciniu-disipaciniu sąryšiu ir Lanževeno šaltinio intensyvumas išreikštas difuzijos konstanta *D*.

Lanževeno lygtį galima pakeisti ekvivalenčia Einšteino-Smoluchovskio lygtimi:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{m\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\left[U'(x) - A\cos(\Omega t)\right]P\right\} + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}.$$

Skaitmeniniai Lanževeno lygties sprendiniai *x*(*t*) pailiustruoti šiame paveiksle



Šiuose paveiksliukuose triukšmo intensyvumas (difuzijos koeficientas *D*) didinamas iš apačios į viršų. Viduriniame brėžinyje punktyrine linija pavaizduotas išorinis periodinis signalas $A\cos(\Omega t)$. Matome, kad esant vidutiniam triukšmo intensyvumui sistema sinchronizuojasi su išoriniu signalu ir reiškia atsako signalo *x*(*t*) spektre bus stebimas didžiausias pikas ties išorinės jėgos dažniu Ω. Kai triukšmo intensyvumas pernelyg mažas arba pernelyg didelis atsako signale $x(t)$ periodinio signalo dedamoji su dažniu Ω bus maža.

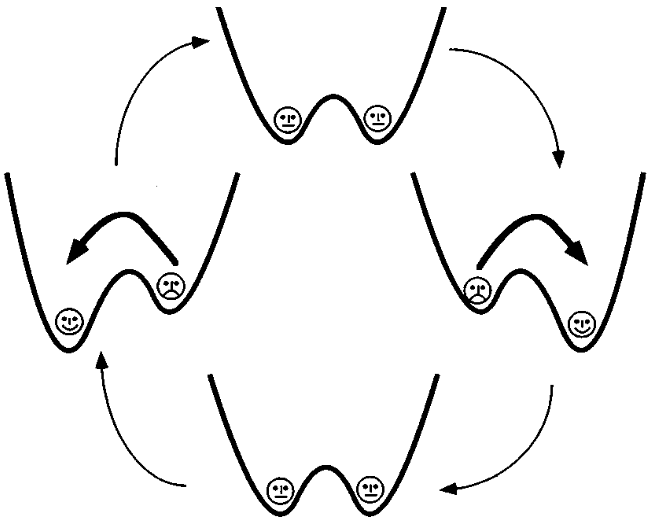
Kokybiškai SR reiškinys paaiškinamas gana paprastai. Periodinį signalą galima įtraukti į potencialo apibrėžimą:

$$\tilde{U}(x,t) = U(x) - Ax\cos(\Omega t).$$

Šio potencialo evoliucija per išorinio lauko periodą pavaizduota žemiau pateiktame paveiksle. Matome, kad periodinis signalas palengvina difundavimą per barjerą, kai išorinio signalo periodas $T = 2\pi/\Omega$ yra dvigubai didesnis už Kramerso difundavimo laiką (kuris priklauso nuo triukšmo intensyvumo):

$$\tau_K = \frac{2\pi}{\mu} \frac{1}{\sqrt{U''(x_{\min})|U''(x_{\max})|}} \exp\left(\frac{\Delta U}{kT}\right).$$

Kai tenkinama rezonanso sąlyga $T = 2\tau_K$, sistemos atsakas į periodinį signalą yra didžiausias. Periodinis signalas pastiprinamas dėl triukšmo – triukšmo energija perduodama į periodinio signalo energiją.



Čia pavaizduota $\tilde{U}(x,t)$ potencialo evoliucija per išorinės jėgos periodą T, kai tenkinama rezonanso sąlyga $T = 2\tau_K$.

Šio uždavinio Lanževeno arba Einšteino-Smoluchovskio lygčių analiziškai išspręsti nepavyksta. Tačiau galima užrašyti supaprastintą ***dviejų būsenų kinetinę lygtį***, kurią pavyksta išspręsti analiziškai. Šios lygties sprendiniai gana tiksliai nusako SR savybes.

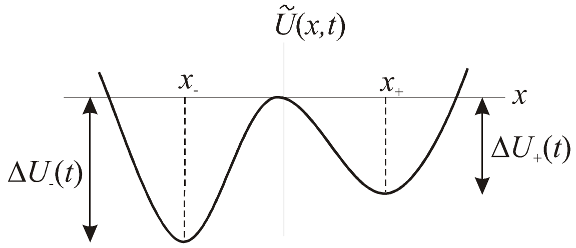
Šio uždavinio tikslas išnagrinėti SR dviejų būsenų kinetinės lygties artėjime.

a) Tarkime, kad dvislėnis potencialas išreiškiamas ketvirtos eilės polinomu

$$U(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4.$$

Kai nėra periodinės jėgos barjerų aukščiai abiejų minimumų būsenose $x_{\min} = \pm x_m = \pm 1$ yra vienodi $\Delta U_0 = 1/4$. Panagrinėkite kaip kinta barjerų aukščiai esant mažos amplitudės periodiniam signalui,

$$\tilde{U}(x,t) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 - Ax\cos(\Omega t)$$



Parodykite, kad $\Delta U_{\pm}(t) \approx \Delta U_0 \pm Ax_m \cos(\Omega t)$.

b) Tarkime, kad sistema gali rastis tik dviejuose būsenose, atitinkančiuose potencialo minimus $+x_m$, arba $-x_m$. Perėjimo greičiai (tikimybės) iš vienos būsenos į kitą aprašomi Kramerso formule

$$\nu_{\pm} = \frac{\mu}{2\pi}\sqrt{U''(x_{\min})|U''(x_{\max})|}\,\exp\left(-\mu\frac{\Delta U_0 \pm Ax_m\cos(\Omega t)}{D}\right) = \nu_0 \exp\left(\mp\frac{A\mu x_m\cos(\Omega t)}{D}\right)$$

čia

$$\nu_0 = \frac{\mu}{2\pi}\sqrt{U''(x_{\min})|U''(x_{\max})|}\,\exp\left(-\mu\frac{\Delta U_0}{D}\right)$$

yra nesutrikdytas (be periodinio lauko) Kramerso greitis. Kai periodinio signalo amplitudė maža, tai

$$\nu_{\pm}(t) = \nu_0[1 \mp \varepsilon\cos(\Omega t)], \quad \varepsilon = \frac{A\mu x_m}{D} << 1.$$

Tegul $n_{\pm}(t)$ yra tikimybės, kad momentu *t* sistema yra $\pm x_m$ būsenose. Tuomet šioms tikimybėms galima užrašyti pagrindinę kinetinę lygtį

$$\dot{n}_+ = -\nu_+(t)n_+ + \nu_-(t)n_-, \quad \dot{n}_- = -\nu_-(t)n_- + \nu_+(t)n_+, \quad (n_+ + n_- = 1).$$

Išspręskite šias lygtis su pradinėm sąlygom ties $t = t_0$:

$$n_+(t_0) = \begin{cases} 1, kai\; x_0 = x_m; \\ 0, kai\; x_0 = -x_m \end{cases} \qquad n_-(t_0) = \begin{cases} 0, kai\; x_0 = x_m; \\ 1, kai\; x_0 = -x_m \end{cases}$$

Sprendinius su fiksuotomis pradinėmis sąlygomis galima užrašyti kaip sąlygines tikimybes $n_{\pm}(t) \equiv n_{\pm}(x_0, t_0|t)$. Čia $n_{\pm}(x_0, t_0|t)$ yra tikimybė, kad sistema pradiniu momentu t_0 esanti būsenoje x_0, momentu *t* pereis į būseną $\pm x_m$. Tuomet perėjimo tikimybė $P(x_0, t_0|x, t) = n_+(x_0, t_0|t)\delta(x - x_m) + n_-(x_0, t_0|t)\delta(x + x_m)$.

c) Suraskite $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x_0, t_0|x, t)dx$ asimptotinėje riboje $t_0 \to -\infty$. Parodykite, kad

$$\langle x \rangle = \bar{x}(D)\cos[\Omega t + \bar{\varphi}(D)].$$

Nupieškite amplitudės $\bar{x}$ priklausomybę nuo triukšmo intensyvumo *D* ir parodykite, kad ji turi maksimumą ties tam tikru $D = D_{SR}$. Tai yra pagrindinis SR efektas!

8. Apskaičiuokite SR signalas-triukšmas santykį (STS). Tai yra standartinė charakteristika, kuri naudojama silpnų signalų detekcijos teorijoje
   a) Panaudojus praeito uždavinio (7) rezultatus apskaičiuokite koreliacinę funkciją

$$K(t,\tau) = \langle x(t)x(t+\tau)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, xx' P(x_0, t_0 | x, t) P(x, t | x', t+\tau)$$

asimptotinėje riboje $t_0 \to -\infty$. Kadangi sistemą veikia periodinė jėga ši funkcija periodiškai priklauso nuo laiko *t*. Apskaičiuokite suvidurkintą pagal išorinės jėgos periodą koreliatoriaus vertę

$$K(\tau) \equiv \frac{1}{T}\int_0^T dt\, K(t,\tau), \quad T = \frac{2\pi}{\Omega}.$$

Šis vidurkinimas atitinka vidurkinimą pagal periodinės jėgos atsitiktinę fazę.

b) Apskaičiuokite spektrinį tankį

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, K(\tau) e^{-i\omega\tau}.$$

Parodykite, kad šios funkcijos išraiška yra tokia:

$$S(\omega) = S_{tr}(\omega) + S_s(\omega)\left[\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega)\right].$$

Čia $S_{tr}(\omega)$ yra triukšminio signalo spektrinis tankis, o $S_s(\omega)$ – periodinio signalo intensyvumas. STS pagal apibrėžimą yra

$$STS = \frac{S_s(\Omega)}{S_{tr}(\Omega)}.$$

Apskaičiuokite *STS* ir nupieškite jo priklausomybę nuo triukšmo intensyvumo, t.y. $STS = STS(D)$. Suraskite analizinę $D = D_{SR}$ vertę, kuriai esant $STS(D)$ pasiekia maksimumą.