Л.9. Розрахунок часових кореляційних функцій

Часові кореляційні функції $F_{AB}(k,t) = < A(k,t)B^*(k,t=0) >$

Властивості часових кореляційних функцій

$$< B(k,t)A^*(k,t=0) > = < A(k,t)B^*(k,t=0) >$$

$$\frac{\partial}{\partial t}F_{AA}(k,t)\,|_{t=0} = < \frac{\partial}{\partial t}A(k,t)\,|_{t=0}\; A^*(k,t=0) > \equiv 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}F_{AB}(k,t) = < \frac{\partial}{\partial t}A(k,t)B^*(k,t=0) >$$

$$= - < A(k,t)\frac{\partial}{\partial t}B^*(k,t)\,|_{t=0} >$$

Короткочасові розклади часових кореляційних функцій

Часові автокореляційні функції

$$F_{AA}(k,t) = F_{AA}(k,t=0) + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 F_{AA}}{\partial t^2}\Big|_{t=0} t^2 + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4 F_{AA}}{\partial t^4}\Big|_{t=0} t^4 + \ldots$$

$$= F_{AA}(k,t=0)[1 - <\omega^2> \frac{1}{2!} t^2 + <\omega^4> \frac{1}{4!} t^4 + \ldots]$$

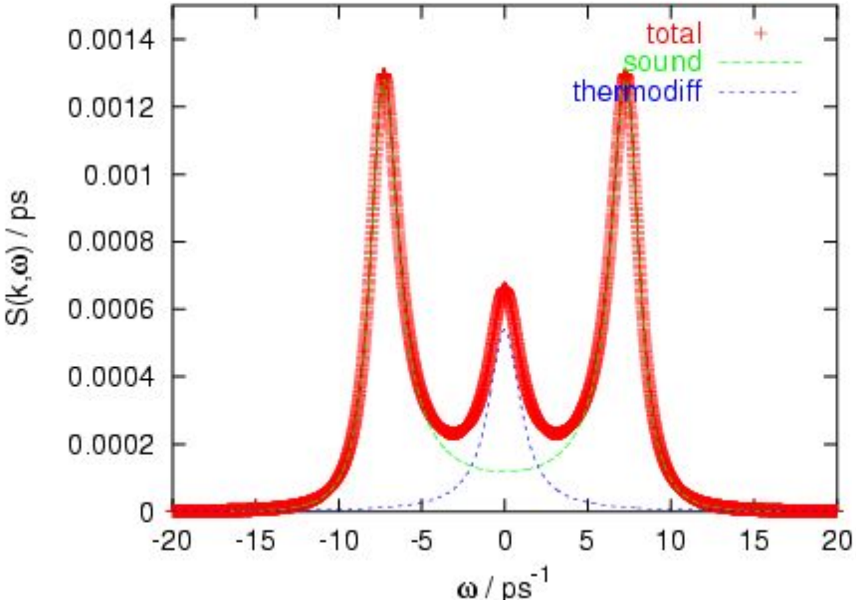
$<\omega^{2n}>$ - частотні моменти

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} S_{AA}(k,\omega) d\omega = (-1)^n \frac{\partial^{2n} F_{AA}}{\partial t^{2n}}\Big|_{t=0}$$

Фур'є-компоненти часових кореляційних функцій

Спектральне представлення

$$S_{AB}(k,\omega)=\int_0^\infty F_{AB}(k,t)e^{i\omega t}dt$$



Динамічні структурні фактори

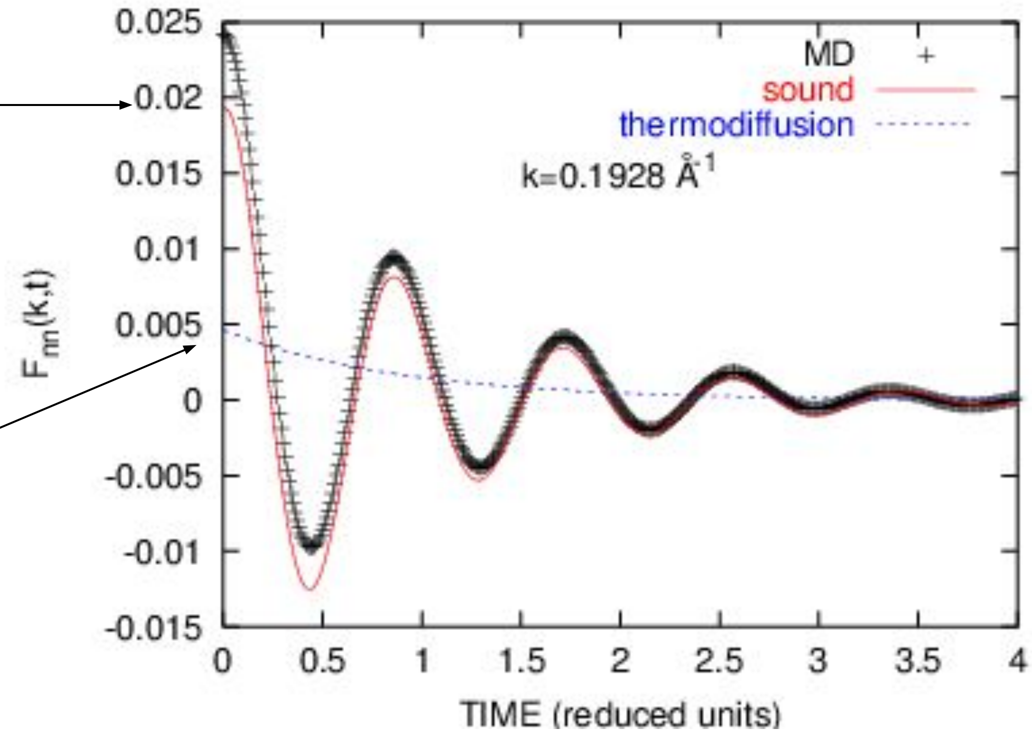
$$S_{nn}(k,\omega)$$

Просторова Фур'є-компонента густини частинок

$$n_{\vec{k}}(t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}e^{i\vec{k}\vec{r}_i(t)}$$

Часові кореляційні функції “густина-густина”

$\frac{1}{\gamma}S(k)$



$\frac{\gamma-1}{\gamma}S(k)$

$$\frac{C_p}{C_v}=\gamma=1.23$$ для рідкого Pb

Повздовжний та поперечний потоки частинок

Просторова Фур'є-компонента густини потоку частинок

$$\vec{J}_{\vec{k}}(t) = \frac{m}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i e^{i\vec{k}\vec{r}_i(t)}$$

Повздовжнякомпонента густини потоку частинок

$$J^{L}_{\vec{k}} = \frac{1}{k}(\vec{k}\vec{J}_{\vec{k}})$$

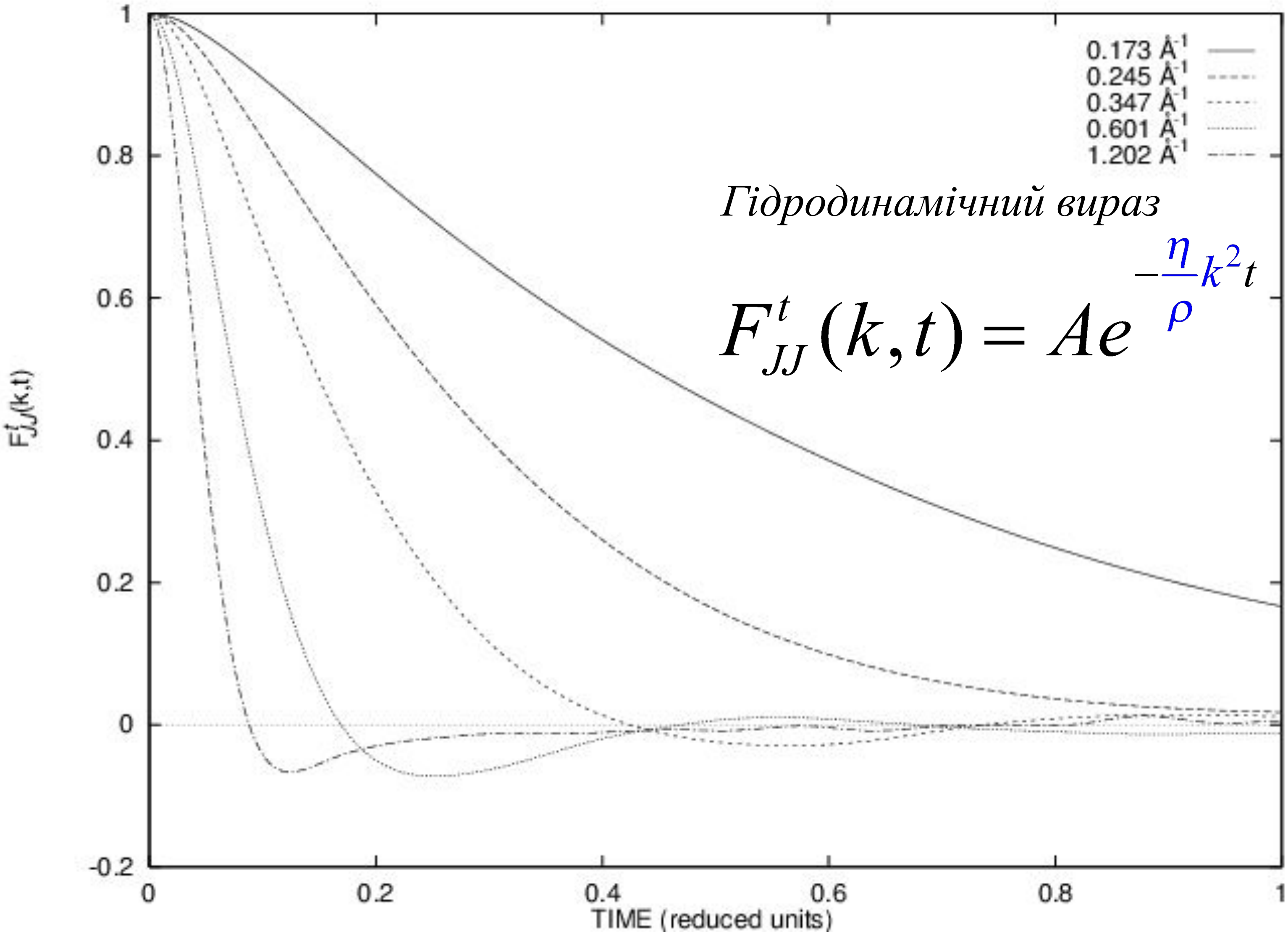
Поперечна компонента густини потоку частинок

$$\vec{J}^{T}_{\vec{k}} = \frac{1}{k}[\vec{k} \times \vec{J}_{\vec{k}}]$$

Автокореляційна функція поперечного потоку

$$F^{T}_{JJ}(k,t) = <\vec{J}^{T}_{\vec{k}}(t)\vec{J}^{T*}_{\vec{k}}(t=0)>$$

Часові автокореляційні функції поперечного потоку



Гідродинамічний вираз

$$F^t_{JJ}(k,t) = Ae^{-\frac{\eta}{\rho}k^2 t}$$

Рівняння неперервності

Просторова Фур'є-компонента густини потоку частинок

$$\vec{J}_{\vec{k}}(t) = \frac{m}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i e^{i\vec{k}\vec{r}_i(t)}$$

$$\frac{\partial n_{\vec{k}}(t)}{\partial t} = \frac{i}{m} \vec{k}\vec{J}_{\vec{k}}(t) = \frac{ik}{m} J^L_{\vec{k}}(t)$$

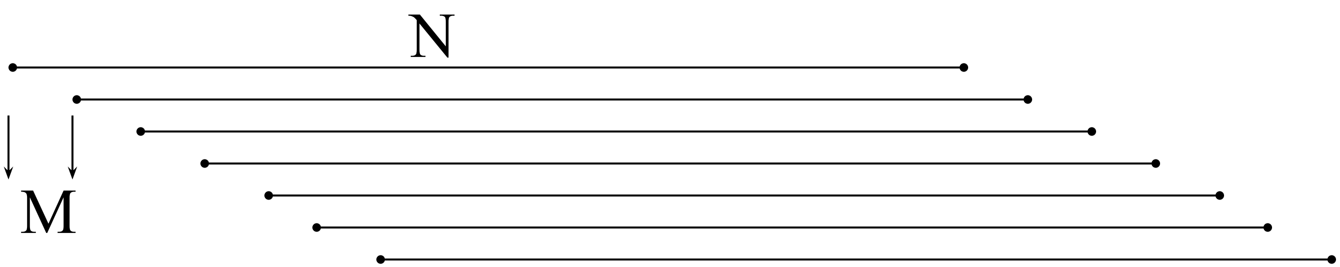
Співвідношення між динамічним стректурним фактором та спектральною функцією потоку

$$S_{JJ}(k,\omega) = \frac{m^2\omega^2}{k^2} S_{nn}(k,\omega)$$

Розрахунок часових кореляційних функцій за допомогою статистичних усереднень

Алгоритм розрахунку часових кореляційних функцій

1. Задається довжина N часової кореляційної функції та відстань M між початковими моментами (t=0)

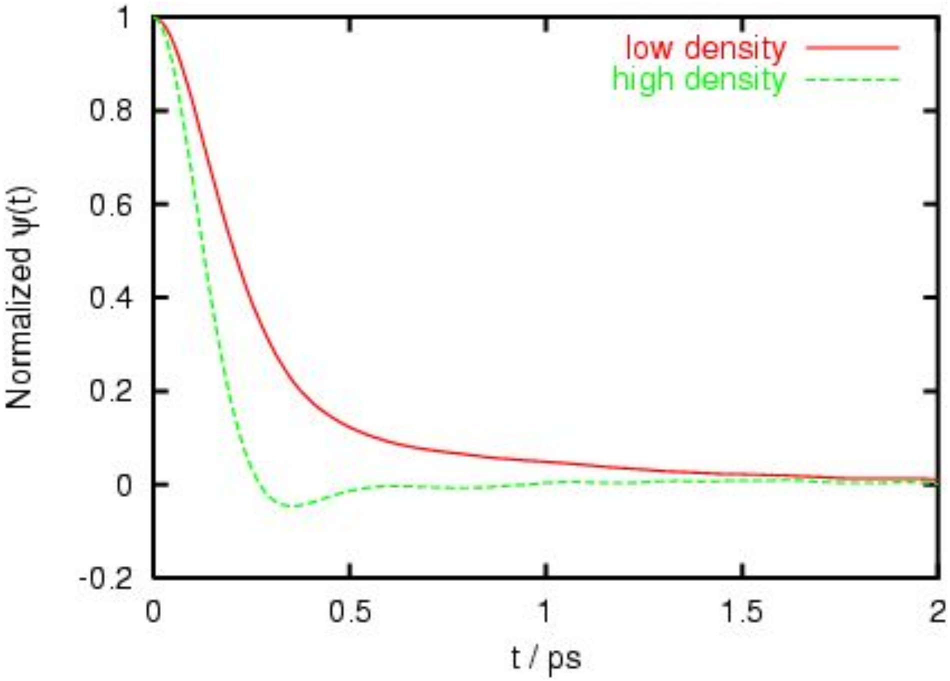


2. Для кожного початкового моменту розраховується N добутків (A(1)B(I)) та (B(1)A(I)) для I=1,N та їхнє середнє

$$[(A(1)B(I)) + (B(1)A(I))]/2$$ сумується.

3. Сума нормується на кількість усереднень (які можуть відрізнятись для різних I !!!)

Автокореляційні функції швидкостей



Зв’язок автокореляційної функції швидкостей з коефіцієнтом самодифузії (формула Гріна-Кубо)

$$D = \int_0^\infty \psi(t)dt$$

$$\psi(t) = \frac{1}{3} < \vec{v}_i(t)\vec{v}_i(0) >= \lim_{k\to 0}\left[-\frac{1}{k^2}\frac{d^2}{dt^2}F_s(k,t)\right]$$

Автокореляційна функція одночастинкової густини

$$F_s(k,t) = e^{-Dk^2t}, \qquad k \to 0$$

Середньоквадратичні зміщення

$$< \Delta r^2(t) >= \frac{1}{N} < \sum_{i=1}^{N} [\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t=0)]^2 >$$

Зв'язок середньоквадратичних зміщень з коефіцієнтом самодифузії

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{< \Delta r^2(t) >}{6t}$$

Зв'язок середньоквадратичних зміщень з автокореляційною функцією швидкостей

$$< \Delta r^2(t) >= \frac{6k_B T}{m} \int_0^t \psi(\tau)(t-\tau)d\tau$$

Розрахунки в’язкості рідини

Компоненти тензора напружень

$$\sigma_{\alpha\beta}(t) = m\sum_{i=1}^{N} v_i^{\alpha}(t) v_i^{\beta}(t) + \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N} r_{ij}^{\alpha}(t) F_{ij}^{\beta}(t)$$

Автокореляційною функцією напружень

$$\eta(t) = \frac{1}{3Vk_B T}\sum_{\alpha\beta} < \sigma_{\alpha\beta}(t)\sigma_{\alpha\beta}(0) >$$

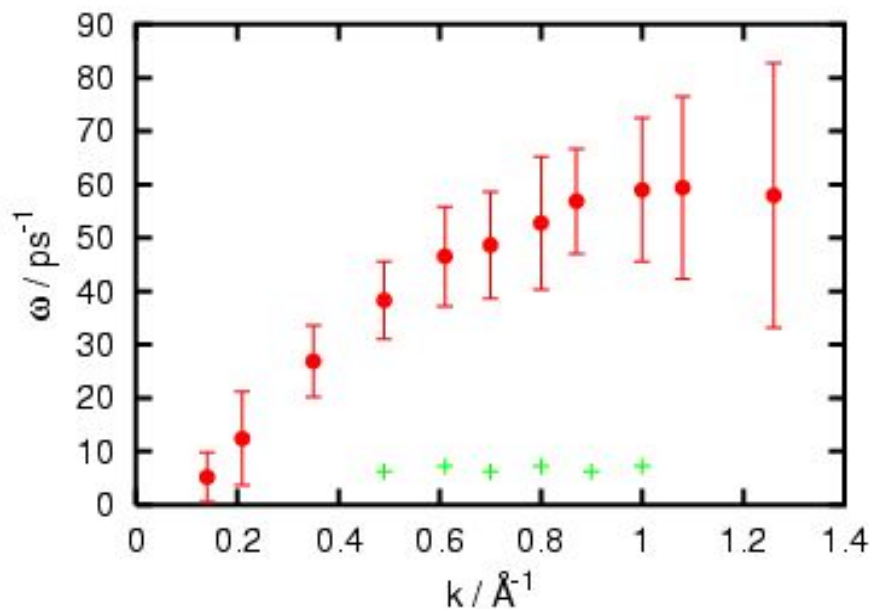
Зсувна в’язкість

$$\eta_s = \int_0^{\infty} \eta(t) dt$$

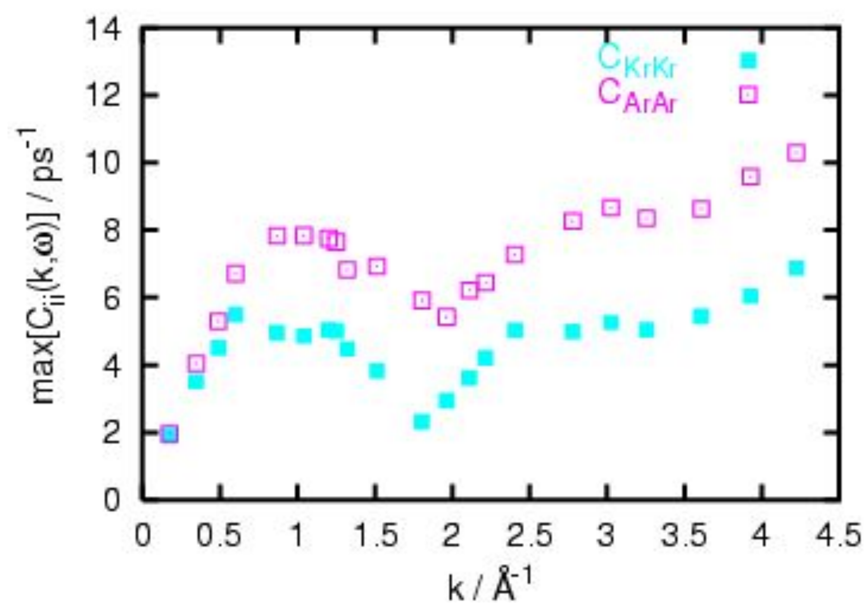
Визначення властивостей поширення звука в середовищі

$$\max S_{ii}(k,\omega) \rightarrow \omega_i(k)$$

$$\max C_{ii}(k,\omega) \rightarrow \omega_i(k)$$



Bosse *et al* (1986) "Швидкий звук" у дво-компонентній рідкій системі Li_4Pb (R~30)



Дисперсійні криві в рідкому KrAr (R=2.09), з $C_{ii}(k,\omega)$