

CHAPITRE 4. Nanotubes

Exercices

I. STOCHASTIC DESCRIPTIONS

1. **Changement de variable dans des équations stochastique** L'équation de Langevin

$$\frac{dx_i}{dt} = b_i(\mathbf{x}) + q_{ij}(\mathbf{x})\psi_j(t), \quad \langle \psi_i(t)\psi_j(t') \rangle = \delta_{ij}\delta(t-t') \quad (1)$$

(avec sommation sur les indices répétés) est équivalent, dans l'interprétation de Ito, à l'équation Fokker-Planck:

$$\frac{\partial}{\partial t}p(\mathbf{y}, t) = -\frac{\partial}{\partial y_i} \left(b_i(\mathbf{y})p(\mathbf{y}; t) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y_j} q_{ik}(\mathbf{y})q_{jk}(\mathbf{y})p(\mathbf{y}; t) \right) \quad (2)$$

Faites un changement de variables $y_i \rightarrow y_i(\mathbf{z})$ dans l'équation Fokker-Planck et dérivez l'équation Fokker-Planck pour la fonction $\tilde{p}(\mathbf{z}; t)$. Quel est le nouveau "drift" b_i et la nouvelle matrice de corrélation $q_{ik}q_{jk}$? Quel est l'équation de Langevin pour les variables z ?

2. **Multiscale Expansion** Soit un système des coordonnées \mathbf{z} et l'Hamiltonien $H(\mathbf{z})$. Pour deux fonctions arbitraires, une fonction de l'Hamiltonien $g(H(\mathbf{z}))$ et une fonction des coordonnées $\rho_1(\mathbf{z})$, prouvez que:

$$0 = \int g(H(\mathbf{z}))\{\rho_1, H\}d\mathbf{z} \quad (3)$$

3. **Multiscale Expansion** Le terme d'ordre zéro satisfait l'équation

$$0 = \frac{\partial}{\partial R}f_0(E, R) + \left\langle \frac{\partial H(\mathbf{z}, R)}{\partial R} \right\rangle \frac{\partial}{\partial E}f_0(E, R) \quad (4)$$

où $\langle \dots \rangle$ est la moyenne microcanonique. Pour la condition initiale $f_0(E, R(0)) = \delta(E - E_0)/\Sigma(E, R(0))$ (où Σ est la normalisation), prouvez que la fonction $f_0(E, R(t)) = \delta(E - E')/\Sigma(E, R(t))$ avec

$$\int d\mathbf{z}\Theta(E' - H(\mathbf{z}, R(t))) = \int d\mathbf{z}\Theta(E_0 - H(\mathbf{z}, R(0))) \quad (5)$$

est une solution.

4. **Generalized Langevin Equation** Soit la Hamiltonienne $H(X, Y) = H_S(X) + H_B(X, Y)$, avec $X = X_1, \dots, X_N, Y = Y_1, \dots, Y_M$, et les équations des mouvements

$$dX_i/dt = A_{ij}\partial_{X_j}H \quad (6)$$

$$dY_i/dt = B_{ij}\partial_{Y_j}H \quad (7)$$

avec $A_{ij} = -A_{ji}$ et $B_{ij} = -B_{ji}$, et

$$H_B(X, Y) = \frac{1}{2}(Y_i - a_i(X))K_{ij}(Y_j - a_j(X)) \quad (8)$$

- (a) Vérifier que H est conservée
- (b) Développer l'équation pour dY/dt
- (c) Développer la solution formelle de $Y(t)$
- (d) Faire une intégration par parties de sorte que on trouve da/dt dans l'intégral
- (e) Remplacer da/dt par dX/dt .
- (f) En utilisant ces résultats, écrire l'équation de mouvement de X .
- (g) Identifier la force fluctuante, $F_i(T)$.
- (h) Si $P(Y(0)|X(0)) \sim e^{-H_B(X(0), Y(0))/k_B T}$, montrer que

$$\langle Y_i(0) \rangle = a_i(X(0)) \quad (9)$$

$$\langle (Y_i(0) - a(X_i(0)))(Y_j(0) - a(X_j(0))) \rangle = k_B T K^{-1} \quad (10)$$

et

$$\langle F_i(t) \rangle = 0 \quad (11)$$

$$\langle F_i(t)F_j(t') \rangle = k_B T L_{ij}(t - t'), L(t) = K \cdot e^{tB \cdot K} \quad (12)$$