国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第11卷第2期　1989年6月　Vol.11.No.2

关于布朗运动"记忆"效应的一个模型

兰马羣

（应用物理系）

摘　要　布朗运动能够概括一大类物理现象，因此一直受到人们的重视。近年来，计算机模拟和实验的结果都表明，布朗运动具有"记忆"效应。本文试图对布朗运动"记忆"效应构造一个模型。在稳定情况下计算结果表明，微粒位移涨落的二次矩仍与时间间隔 t 成正比，"记忆"效应表现为流体的粘滞性加大。

关键词　分子物理，分子运动论，布朗运动；广义朗之万方程，记忆函数

分类号　O552.1,O414.22

引　言

1827年，R Brown 首先观测了悬浮在气体及液体中的粒子的无规则运动。本世纪初 Einstein, Smoluchowski，Langevin 奠定了布朗运动的理论基础，1908 年 Perrin 从实验上验证了他们的理论的正确性，粒子在流体中的运动是一种纯粹的随机过程。

布朗运动是一个十分简单而又重要的课题，它可以构造很多物理模型，还可以检验非平衡统计的一些基本出发点，因此现在仍然受到人们的重视。1967年，美国的劳伦斯·利弗莫尔实验室用计算机模拟布朗运动；1983年，美国宾夕法尼亚利哈伊大学用激光做布朗运动实验[1]。模拟和实验的结果都表明，布朗运动并非象以前认为的那样是一种纯粹的随机过程，粒子对于自身的运动存在着某种"记忆"。在一个含有一定数量粒子的集体中，以前相遇过的粒子将相互"提示"彼此以前的速度，因而它们的运动不是完全无规则的。

1　布朗运动方程

利用投影算符技术，可以得到刘维空间中矢量 $\vec{A}(t)$ 所满足的广义 Langevin 方程或 Mori 方程[2]：

$$\frac{d\vec{A}(t)}{dt}=i\Omega\vec{A}(t)-\int_0^t d\tau K(t-\tau)\vec{A}(\tau)+\vec{F}(t) \tag{1}$$

其中

1988年8月8日收稿

$$i\Omega=(i\mathrm{L}\vec{A},\vec{A}^{+})(\vec{A},\vec{A}^{+})^{-1}=(\dot{\vec{A}},\vec{A}^{+})(\vec{A},\vec{A}^{+})^{-1} \tag{2}$$

L为刘维算符，$(\vec{A},\vec{A}^{+})$为内积，Ω为$\vec{A}$的集体振荡频率。

$$K(t)=(\vec{F}(t),\ \vec{F}^{+}(0))(\vec{A},\vec{A}^{+})^{-1} \tag{3}$$

为记忆函数，它由$\vec{F}(t)$的时间自关联决定。

$$\vec{F}(t)=e^{iQLt}iQ\mathrm{L}\vec{A} \tag{4}$$

是随机力，Q是正交的投影算符。$\vec{F}(t)$ 属于正交的子空间，$(\vec{F}(t),\ \vec{A}^{+})=0$.

(1)式右端第一项表示振荡作用；第二项为阻尼作用和由记忆函数产生的推迟效应，可保留非马尔可夫效应；第三项为随机作用。当无规力具有比$\vec{A}(t)$远为短的弛豫时间时，广义 Langevin 方程就变成普通的 Langevin 方程，即马尔可夫近似。

若无外力场，则不考虑集体振荡，即 $\Omega=0$. 设 $\vec{A}(t)$ 是布朗粒子的速度$v(t)$，则(1) 式变成

$$\frac{dv(t)}{dt}=-\int_0^t d\tau K(t-\tau)v(\tau)+F(t) \tag{5}$$

设$x(t)$是粒子的位移，则

$$\frac{dx(t)}{dt}=v(t) \tag{6}$$

(5)式和(6)式就是我们要研究的布朗运动方程。

2 位移涨落二次矩的计算公式

对(5)，(6)式作拉普拉斯变换：

$$\bar{v}(p)=\int_0^\infty e^{-pt}v(t)dt$$

$$\bar{x}(p)=\int_0^\infty e^{-pt}x(t)dt$$

$$\bar{K}(p)=\int_0^\infty e^{-pt}K(t)dt$$

则(5)和(6)式分别变为

$$p\bar{v}(p)-v(0)=-\bar{K}(p)\bar{v}(p)+\bar{F}(p) \tag{7}$$

$$p\bar{x}(p)-x(0)=\bar{v}(p) \tag{8}$$

(7)式和(8)式联立，可解出

$$\bar{x}(p)=\frac{1}{p}x(0)+\bar{H}(p)[v(0)+\bar{F}(p)] \tag{9}$$

$$\bar{v}(p)=\bar{h}(p)[v(0)+\bar{F}(p)] \tag{10}$$

其中定义

$$\bar{H}(p)\equiv\frac{1}{p[p+\bar{K}(p)]} \tag{11}$$

$$\bar{h}(p)\equiv\frac{1}{p+\bar{K}(p)}=\frac{dH(t)}{dt} \tag{12}$$

反演(9)式和(10)式，得到

$$x(t)=x(0)+v(0)H(t)+\int_0^t H(t-\tau)F(\tau)d\tau \tag{13}$$

$$v(t)=v(0)h(t)+\int_0^t h(t-\tau)F(\tau)d\tau \tag{14}$$

再求一次矩，得到

$$\langle x(t)\rangle=x(0)+v(0)H(t) \tag{15}$$

$$\langle v(t)\rangle=v(0)h(t) \tag{16}$$

因此，$H(t)$ 描述了平均位移的衰减，$h(t)$ 描述了平均速度的衰减。由(13)式和(14)式可得

$$\langle v(0)[x(t)-x(0)]\rangle=\langle v^2(0)\rangle H(t) \tag{17}$$

$$\langle v(0)v(t)\rangle=\langle v^2(0)\rangle h(t) \tag{18}$$

根据热力学第二定律，若 $v(0)$ 是麦克斯韦分布，则对于任意时刻 t，$v(t)$ 也应是麦克斯韦分布，即有

$$\langle v^2(t)\rangle=\langle v^2(0)\rangle=\frac{k_BT}{m} \tag{19}$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数，T 是温度，m 是布朗微粒的质量。进而，我们可计算出位移涨落的二次矩为

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\langle[x-x(0)-v(0)H(t)]^2\rangle$$

$$=\frac{k_BT}{m}\left[2\int_0^t H(\tau)d\tau-H^2(t)\right] \tag{20}$$

3　模型和计算结果

考虑布朗运动的"记忆"效应，需对记忆函数采取适当模型。我们假定记忆函数采取以下简明的形式

$$K(t)=\gamma\delta(t)+ae^{-bt} \tag{21}$$

其中第一项是快弛豫部分，要求它随 t 的增加很快下降，而 v 则变化缓慢。但粒子在流体中运动会引起扰动，这种扰动反过来又影响粒子的运动，因而有第二项，它是慢弛豫部分，反映了布朗运动的"记忆"效应。

对 $K(t)$ 作拉普拉斯变换，得到 $\bar{K}(p)$ 为

$$\bar{K}(p)=\gamma+\frac{a}{p+b} \tag{22}$$

根据(11)式可计算出 $\bar{H}(p)$ 为

$$\bar{H}(p)=\frac{1}{p}\cdot\frac{p+b}{p^2+(b+\gamma)p+(\gamma b+a)} \tag{23}$$

再作反演，计算出 $H(t)$ 为

$$H(t)=\frac{b}{\gamma b+a}-\frac{2(\gamma b+a)-b(b+\gamma)}{2(\gamma b+a)\omega}e^{-\frac{1}{2}(b+\gamma)t}\sin\omega t$$

$$-\frac{b}{\gamma b+a}e^{-\frac{1}{2}(b+\gamma)t}\cos\omega t \tag{24}$$

其中令

$$\omega=\left[\frac{4(\gamma b+a)-(b+\gamma)^2}{4}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{25}$$

把(24)式代入(20)式，就计算出位移涨落的二次矩$\langle(\Delta x)^2\rangle$为

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\frac{k_BT}{m}\left[\frac{2b}{\gamma b+a}t+A+Be^{-(b+\gamma)t}+Ce^{-\frac{1}{2}(b+\gamma)t}\sin\omega t\right.$$

$$+De^{-\frac{1}{2}(b+\gamma)t}\cos\omega t+Ee^{-(b+\gamma)t}\cos 2\omega t$$

$$\left.+Fe^{-(b+\gamma)t}\sin 2\omega t\right] \tag{26}$$

其中A，B，C，D，E，F都是含a, b, γ的复杂常数。一般情况下γ的数值很大($\sim 10^7$)，在很短的时间后，第三项指数衰减变得很小，可以忽略；第四项至第七项是指数衰减型变幅振荡，也可以忽略；如果假定所有粒子在$t=0$时均处在$x=0$处，则取$A=0$. 因此，在稳定情况下，结果简化为

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=2\cdot\frac{k_BT}{m\gamma+ma/b}t \tag{27}$$

4 讨 论

4.1 无记忆情形

当$a=0$，则

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=2\cdot\frac{k_BT}{m\gamma}t=2\cdot\frac{k_BT}{\alpha}t \tag{28}$$

其中$\alpha=m\gamma=6\pi r\eta$，$r$是布朗微粒的半径，$\eta$是流体的粘滞系数，这与朗之万理论的结果相同[3]。

4.2 有记忆情形

当$a\neq 0$，则

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=2\cdot\frac{k_BT}{\alpha+ma/b}t \tag{29}$$

在时间间隔t内，微粒位移涨落的二次矩$\langle(\Delta x)^2\rangle$仍与时间间隔$t$成正比，但比例系数与朗之万理论不同，记忆的效应表现为流体的粒滞性加大。

4.3 理论解释

布朗微粒在流体中的运动会激起一个扰动，这就是扰动波；反过来，扰动波对微粒的输运过程产生影响，从而改变输运系数[4]。

4.4 实验检验

画出$\langle(\Delta x)^2\rangle$— t 曲线，由其斜率就可以检验模型的正确性，并给出 a，b 之值。再则，根据布朗运动的朗之万理论，可以求玻尔兹曼常数k_B之值，求出的k_B值系统地偏小($1.21\times10^{-23}\sim1.37\times10^{-23}$J·K^{-1})，这一结果是对本模型的有力支持。

感谢岳宗五教授对本工作的支持和关心。

参 考 文 献

[1] 中国百科年鉴．1983：454
[2] 郝柏林等．统计物理学进展．科学出版社，1981：383
[3] 汪志诚．热力学·统计物理．高等教育出版社，1980：348
[4] 郝柏林等．统计物理学进展．科学出版社，1981：261

A Model of Memory Effect of Brownian Motion

Lan Maqun

Abstract

Much attention has been paid to the Brownian Motion summing up a class of physical phenomena. Recently, both computer simulations and experiments have shown that a "memory effect" is attached to the Brownian motion. A model for describing this effect has been constructed in this paper. The results of the calculations in steady case have shown that the second moment of the displacement fluctuation of micro particles is still proportional to the time intervals, and this effect eventually expresses the increase in fluid viscosity.

Key Words: molecular physics, kinetic theory, Brownian motion, Generalized Langevin equation, memory functions