

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{\eta}{2} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = k_B T \quad (8.6)$$

$$\rightarrow \langle x^2 \rangle = \underbrace{x_{\infty}^2 (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})}_{\text{Lsg. der homog. Gl.}} + \underbrace{\frac{2k_B T}{\eta} t}_{\text{partikuläre Lsg. von (8.6)}} \quad (8.7)$$

Lsg. der homog. Gl.

$$\langle x^2 \rangle = \begin{cases} 0, & t=0 \\ x_{\infty}^2, & t \rightarrow \infty \end{cases}$$

„Bewegung durch Impulsrelaxation“

$t \gg \tau$

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = 2Dt} \quad (8.8)$$

... diffusive Bewegung!

mit

$$\boxed{D = \frac{k_B T}{\eta}} \quad (8.9)$$

... Einstein relation

Bsp: für Fluktuationssatz (D)
- Dissipations (η)
- Theorem

• Abschätzung:

(1) Teilchen: Radius $a = 1 \mu\text{m}$, $\rho = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kg}}{\ell}$, in H_2O : $\eta = 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}$

$$\left. \begin{aligned} \rightarrow m &= 4 \cdot 10^{-15} \text{kg} \\ \rho &= 6\pi\eta a = 2 \cdot 10^{-8} \frac{\text{kg}}{\text{s}} \end{aligned} \right\} \rightarrow \tau = \frac{m}{\rho} \approx 2 \cdot 10^{-7} \text{s}$$

$$(2) D = \frac{k_B T}{\eta} = \frac{4 \cdot 10^{-21}}{2 \cdot 10^{-8}} = 2 \cdot 10^{-13} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} = 0.2 \frac{\mu\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$t = 100 \text{s} \rightarrow \sqrt{\langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle} = 10 \mu\text{m}!$$

8.3 Einstein's Zugang

- Betrachte viele voneinander unabhängige Teilchen:

Führe ein: (10-Behandlung)

$$\boxed{f(x,t) dx \dots \text{Zahl der Teilchen im Bereich } [x, x+dx]} \quad (8.10)$$

- zeitliche Entwicklung zur Zeit $t+\tau$?

(i) Führe ein:

$$\boxed{\begin{aligned} \phi(\Delta) d\Delta \dots & \text{Wahrscheinlichkeit für Schritt der Länge} \\ & \text{aus } [\Delta, \Delta+d\Delta] \text{ im Zeitintervall} \\ \text{mit Normierung: } & \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta = 1 \\ \text{Symmetrie: } & \phi(\Delta) = \phi(-\Delta) \end{aligned}} \quad (8.11)$$

Damit
$$\boxed{f(x, t+\tau) dx = dx \int f(x-\Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta} \quad (8.12)$$

Zahl der Teilchen (pro Längeneinheit),
die in Zeit τ von $x-\Delta$ nach x schreiten!

Bem.: (i) Markov-Annahme

$f(x, t+\tau)$ hängt nur von unmittelbarer Vergangenheit
zur Zeit t ab, kein Gedächtnis für gesamten
Zeitverlauf von f

(ii) (8.12) ... spezielle Form der Chapman-Kolmogorov-Gl.

[s. Kap. 9]

(ii) verwende:

$$\left. \begin{aligned} f(x, t+\tau) & \stackrel{\text{I klein}}{=} f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} + \dots \\ f(x-\Delta, t) & = f(x, t) - \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots \end{aligned} \right\} \text{ in (8.12)}$$

$$\rightarrow \boxed{f + \frac{\partial f}{\partial t} \tau = f \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta}_{(8.11)=1} - \frac{\partial f}{\partial x} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Delta \phi(\Delta) d\Delta}_{(8.11)=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta + \dots} \quad (8.13)$$

... Beispiel einer Kramers-Moyal-Entw.
[s. Kap. 11]

(iii) \rightarrow
$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (8.14)$$

mit $D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$

... Diffusionsgl.

= spezielle Form der Fokker-Planck-Gl. [s. Kap. 11]

" " " Smoluchowski-Gl. [s. Kap. 10]

(iv) Zusammenhang mit Langevin-Zugang?

Lösung für $f(x,0) = n \delta(x)$: (n ... Gesamt-Teilchenzahl)

$$f(x,t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

mit 2. Moment: $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{n} \int x^2 f(x,t) = 2Dt$

wie in Gl. (8.8) $\rightarrow D = \frac{k_B T}{\gamma}$

9. Einige Elemente der Wahrscheinlichkeitslehre

• Details für Kap. 9.1/9.2: s. Stat. Physik WS12/13, Kap. 3

9.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung P(x)

• Def: $\left. \begin{array}{l} \text{stochastische} \\ \text{Zufalls-} \end{array} \right\} \text{Variable } x \text{ gegeben durch}$ (9.1)

(i) Wertebereich
(ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung

• Kontinuierliche Verteilung:

$$x \in S = [x_1, x_2]$$

$P(x) dx$... Wahrscheinlichkeit für $[x, x+dx]$

$P(x)$... " Leitsdichte (funktion)

$$\int_{x_1}^{x_2} P(x) dx = 1 \dots \text{Normierung}$$

(9.2)

• Mittel-/Erwartungswerte einer Observablen $f(x)$:

$$\langle f \rangle = \int f(x) P(x) dx \quad (9.3)$$

Wahrscheinlichkeit mit der $f(x)$ vorkommt!

• n -tes Moment von $P(x)$:

$$\langle x^n \rangle = \int x^n P(x) dx \quad (9.4)$$

(9.5)

insbes.:

(i) Mittelwert: $\langle x \rangle$

(ii) Varianz von x

= Schwankungsquadrat

= mittlere quadratische Abweichung

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \text{Var}(x)$$

Standardabweichung: Δx ... „Breite von $P(x)$ “
Schwankungsbreite

(9.6)

• Bsp: Gaußsche Normalverteilung

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (9.7)$$

Man merke:

$$n \text{ gerade: } \langle (x-x_0)^n \rangle = (n-1)!! \sigma^n$$

$$\text{insbes.: } \langle (x-x_0)^2 \rangle = \sigma^2$$

$$n \text{ ungerade: } \langle (x-x_0)^n \rangle = 0,$$

$$\text{insbes. } \langle x \rangle = x_0$$

(9.8)

• $\boxed{\text{Kamtnis aller } \langle x^n \rangle \leftrightarrow P(x)} \quad (9.9)$

Beweis über charakt. Funktion: $G(k) = \langle e^{-ikx} \rangle$

• mehrdimensionale Verteilungen: $\underline{x} = (x_1, \dots, x_n) \dots$ stochast. Variable

$P(\underline{x}) d^n x \dots$ Wahrscheinlichkeit für $[x_1 + dx_1, \dots, x_n + dx_n]$

(i) unabhängige stochast. Variable x, y :

$\boxed{P(x, y) = P(x) P(y)} \quad (9.10)$

... Multiplikationsregel

(ii) Korrelationsfktn.:

$\boxed{C_{ij} = \langle (x_i - \langle x_i \rangle) (x_j - \langle x_j \rangle) \rangle} \quad (9.11)$
 $= \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$

... Kovarianzmatrix

stochast. unabh. Variable $\rightarrow C_{ij} = 0!$

(iii) $\boxed{\text{Bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte } P(x_1 \dots x_k | x_{k+1} \dots x_n)}$
 für x_1, \dots, x_k , wenn $x_{k+1} \dots x_n$ mit Sicherheit vorliegen:

$$P(x_1 \dots x_k | x_{k+1} \dots x_n) = \frac{P(x_1, \dots, x_n)}{P(x_{k+1}, \dots, x_n)} \quad (9.12)$$

 wobei $P(x_{k+1} \dots x_n) = \int dx_1 \dots dx_k P(x_1, \dots, x_n)$

9.2 Zentraler Grenzwertsatz

Seien x_1, x_2, \dots, x_N voneinander unabhängige Zufallsvariable mit derselben Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(x)$, also insbesondere ist $\langle x_i \rangle = \langle x \rangle$ und $\Delta x_i = \Delta x$, dann genügt die Zufallsvariable $y = x_1 + x_2 + \dots + x_N$ im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ der Gauß'schen Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta y)^2} e^{-\frac{(y - \langle y \rangle)^2}{2(\Delta y)^2}} \quad (9.13)$$

mit $\langle y \rangle = N \langle x \rangle$ und $\Delta y^2 = N \Delta x^2$

Inbesondere gilt: $\frac{\Delta y}{\langle y \rangle} = \frac{\Delta x}{\langle x \rangle} \frac{1}{\sqrt{N}}$ also

Aussagen über y sind für große N scharf.

• Beweis: Stat. Phys. WS12/13 Kap. 3.5

9.3 Zeit abhängige Zufallsvariablen

• Behandlung 10: $x = x(t)$... zeitabhängige Zufallsvariable

• führe ein:

$$P(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n \quad \text{mit } t_1 < t_2 < \dots < t_n$$

... Wahrscheinlichkeit x zur Zeit t_1 in $[x_1, x_1 + dx_1]$

" " t_2 " $[x_2, x_2 + dx_2]$

⋮

t_n in $[x_n, x_n + dx_n]$

vorfunden

(9.14)

Bem: (i) für $n = 1, 2, \dots \rightarrow$ Hierarchie von Wahrscheinlichkeitsdichten

(ii) insbesondere:

$$P(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = \int P(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n \quad (9.15)$$

• Bedingung von Zeitkorrelationsfkt.:

Bsp: $\langle x(t_2) x(t_1) \rangle = \iint x_2 x_1 P(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_1 dx_2 \quad (9.16)$

a) Klassifizierung Stochastischer Prozesse:

• Bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte: [vgl. Gl. (9.12)]

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = \frac{P(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{P(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1)} \quad (9.17)$$

... für x_n, t_n wenn $x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1$ mit Sicherheit vorliegen