Wh: Brown'sche Bewegung

Beschreibung via Diffusionsgleichung

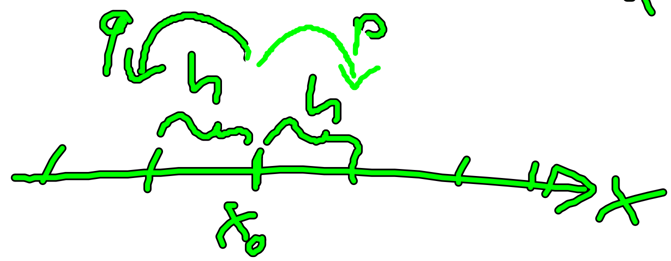
$$\frac{\partial}{\partial t} n(\underline{r},t) = D \nabla^2 n(\underline{r},t)$$

Diffusionskonstante

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\underline{r},t) + \nabla \cdot j_N(\underline{r},t) = 0 \quad , \quad j_N = -D \nabla n(\underline{r},t)$$

Diff.gleichung kann auch wahrscheinlichkeitstheoretisch hergeleitet werden

aus Zufallsbewegung
("Random walk")



p: Wahrsch. nach rechts zu springen

q: " " links " "

(p+q = 1) (Sprungweite h)

betrachte $P(x,t)$, nach der Zeit t an einem bestimmten Ort x zu sein

Übung

Diff.-gleichung in 1 Dimension

$p = q \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)$

$p \neq q \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = - \overbrace{v \frac{\partial}{\partial x} P(x,t)}^{\text{"Drift"}} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)$

(Driftgeschwindigkeit)

<u>beachte:</u>

Die Differentialgleichung ist nichts anderes als eine Fokker-Planck-Gleichung für ein überdämpftes ~~Teilchen~~ Systems ohne Wechselwirkungen

---

<u>Zusammenhang zwischen Diffusion und Reibung (Dissipation)</u>

Betrachte Teilchen in einem Bad mit Viskosität η

Vorstellung:
Ziehe dieses Teilchen, bzw. lasse es absenken, als Folge der Gravitation

(Sedimentation)

Annahme:

$$\underline{F} = -\nabla U(r)$$ Gravitationspotential

$$\underline{F} + \underline{F}^{\text{Reibung}} = 0$$

Teilchenradius

$$\underline{F}^{\text{Reibung}} = -6\pi R \eta \underline{v}$$

Stoke'sche Reibungskraft

Betrachte $\underline{v}$ als "Driftgeschwindigkeit" $\underline{v}^D$

Stromdichte

Ansatz:

$$j(\underline{r},t) = j^{\text{Diffusion}}(\underline{r},t) + j^{\text{Drift}}(\underline{r},t)$$

$$= -D\nabla n(\underline{r},t) + n(\underline{r},t)\,\underline{v}^D(\underline{r},t)$$

Fick'sches Gesetz

$$= -D\nabla n(\underline{r},t) + \frac{1}{6\pi\eta R}\underline{F}\, n(\underline{r},t)$$

Kräftegleichgewicht

Driftstrom

erweiterte Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\underline{r},t) + \nabla \underbrace{\left(\frac{F}{6\pi\eta R}\, n(\underline{r},t) - D\nabla n(\underline{r},t)\right)}_{j} = 0$$

Im thermischen Gleichgewicht

Gravitationspotential

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\underline{r},t) = 0 \quad , \quad n(\underline{r},t) \sim e^{-\beta U(r)}$$

kanonische Höhenformel

$\Leftrightarrow \nabla \cdot j = 0$ (wg. Kontinuitätsgl.)

hier $j(\underline{r},t) = 0$

$j = 0$ totaler Strom verschwindet

$$-D\nabla n(r) + \frac{n(r)}{6\pi\eta R}\underline{F} = 0$$

$$\boxed{\underline{F} = -\nabla U(r)}$$

$$-D\, n(r)(-\nabla U(r)\beta)$$

$$\boxed{n(r) \sim e^{-\beta U(r)}}$$

$$-\frac{n(r)}{6\pi\eta R}\nabla U(R) = 0$$

$$\boxed{\beta = \frac{1}{k_B T}}$$

$$n(r)\nabla U(r)\left[\frac{D}{k_B T} - \frac{1}{6\pi\eta R}\right] = 0$$

$$\rightarrow \boxed{D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R}}$$

Temperatur

Radius

Viskosität

Diffusionskonstante

im thermischen Gleichgewicht!

Beispiel einer Fluktuations-Dissipationsbeziehung

Erinnerung: $\langle (\Delta \underline{r}(t))^2 \rangle = \langle (\underline{r}(t) - \underline{r}(0))^2 \rangle = 6Dt$

mittlere Verschiebungsquadrat

allg.: (nicht-wechselwirkende, unbeschränkte System)

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle (\Delta \underline{r}(t))^2 \rangle}{6t}$$

D ist also Fluktuationsgröße

η repräsentiert Reibung $\Leftrightarrow$ Dissipation

I.5.2 Alternativer Zugang zur Brown'schen Bewegung: Langevin-Gleichung

Motivation:

Betrachte ein Teilchen (Radius R, Masse m)
(im Bad mit Viskosität η)

Newton-Dynamik

$$m\dot{\underline{v}} = \underline{F} = -6\pi R \eta \underline{v}$$

es liegt nur Reibung vor

Lösung: $\underline{v}(t) = \underline{v}(t_0)\, e^{-\gamma(t-t_0)}$

mit $\gamma = \frac{6\pi R\eta}{m}$ Reibungskonstante

$\Rightarrow$ Anfangsgeschw. klingt exponentiell mit der Zeit ab

auf der Zeitskala

$$\tau = \frac{1}{\gamma}$$ „Relaxationszeit"

↯ Zur Brown'schen Beobachtung!

zufällige Bewegung, die lebhaft bleibt in der Zeit!..

$\Rightarrow$ Ansatz von Langevin:

$$\boxed{\underline{\dot{v}}(t) = \underbrace{-\gamma\, \underline{v}(t)}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\underline{f}(t)}_{\text{stochastische Kraft}}}$$

Langevin-Gl.

Formale Bemerkung

$\underline{f}$ ist stochastische Kraft

$\Leftrightarrow$ Die Komponenten sind Zufallsvariablen

$\Longrightarrow$ Langevin-Gl. ist stochastische Differentialgleichung

Annahmen zur stochast. Kraft

a) $\langle f_\alpha(t)\rangle = 0$, $\alpha = x,y,z$

Mittelung über die Wahrsch.verteilung von f

$$\langle f\rangle = \int df'\, f'\, P(f',t)$$

b) Korrelation

$$\langle f_\alpha(t)\, f_\beta(t')\rangle = \int df \int df'\, f_\alpha\, f_\beta'\, P_2(f,t;f',t')$$
$$\overset{!}{=} \Gamma\, \delta_{\alpha\beta}\, \delta(t-t')$$

Interpretation

- verschiedene Komponenten ($\alpha \neq \beta$) der stochast. Kraft sind statistisch unabhängig
- Die stochast. Kraft ändert sich so schnell, dass ihre Werte zu verschiedenen Zeiten unkorreliert sind

„Korrelationszeit Null"

<u>Physikalische Idee</u>:

Die Bad-Teilchen stossen so schnell ($\sim 10^{21}$ mal pro Sekunde) gegen das große Teilchen, dass die resultierende Kraft auf der Zeitskala des großen Teilchens unkorreliert ist!

Wichtig also: <u>Zeitskalenseparation</u>

Damit folgt:

$$\underline{\dot{v}}(t) = -\gamma \underline{v}(t) + \underline{f}(t)$$

(unabhängig von der Vergangenheit!!) (wg. Deltakorrelation)

$\Longrightarrow$ Der zugehörige stochast. Prozess ist ein Markov-Prozess!!

Beachte:

Die Annahme der Delta-artigen Korrelation ist idealisiert real kommt es bei den Stößen zu einem Impulsübertrag zurück auf die Gasmoleküle

$\Longrightarrow$ feedback-Effekt

zugehöriges Leistungsspektrum

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, e^{-i\omega\tau} \langle f_\alpha(0) f_\beta(\tau) \rangle$$

setze ein:

$$\langle f_\alpha(0) f_\beta(\tau) \rangle = \Gamma \delta_{\alpha\beta} \delta(\tau)$$

$$\Rightarrow S_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma \delta_{\alpha\beta}$$

unabhängig von ω $\Longrightarrow$ weißes Rauschen

(Alle Frequenzen treten mit der gleichen Häufigkeit auf)

Lösung der Langevin-Gl.

$$\dot{\underline{v}}(t) = -\gamma \underline{v}(t) + \underbrace{\underline{f}(t)}^{\text{Inhomogenität}}$$

DGL: stochast., inhomogene, linear, 1. Ordnung in der Zeit

allg. Lösung: ergibt sich additiv aus Lösung der homogenen Gl. + spezielle Lösung der inhomogenen

$$\underline{v}(t) = \underline{v}(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)} + \underline{g}(t)$$

$\underline{g}(t)$ durch Variation der Konstanten

$$\dot{\underline{g}}(t) \stackrel{!}{=} -\gamma \underline{g} + \underline{f}$$

Ansatz $\underline{g}(t) = \underline{u}(t) e^{-\gamma(t-t_0)}$

einsetzen

$$\rightarrow \underline{u}(t) = \int_{t_0}^{t} dt' e^{\gamma(t'-t_0)} \underline{f}(t')$$

$$\Rightarrow \boxed{\underline{v}(t) = \underbrace{\underline{v}_0}_{=\underline{v}(t_0)} e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma(t-t_0)} \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{\gamma(t'-t_0)} \, \underline{f}(t')} \quad (*)$$

Lösung für eine bestimmte Realisierung der Zufallskraft

Folgerungen für Mittelwert ?

betrachte

$\langle \underline{v}(t) \rangle_0$ $\hat{=}$ Mittelwert über die stochast. Kraft mit der Anfangsbedingung

$$\langle \underline{v}(t=0) \rangle_0 = \underline{v}_0$$

Mittelung von $(*)$

$$\langle \underline{v}(t) \rangle_0$$

$$= \langle \underline{v}_0 \rangle_0 \, e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma(t-t_0)} \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{\gamma(t'-t_0)} \underbrace{\langle \underline{f}(t') \rangle_0}_{\text{Null!}}$$

benutze

$$\langle \underline{f}(t) \rangle_0 = \langle \underline{f}(t) \rangle = 0$$

Die stochastische Kraft und die Anfangsbeding- sind unabhängig (entspricht der Idee der delta-korrelierten Zufallskraft)

$$\langle \underline{v}_0 \rangle_0 = \underline{v}_0$$

keine Zufallsvariable

$$\Rightarrow \langle \underline{v}(t) \rangle_0 = \underline{v}_0\, e^{-\gamma(t-t_0)}$$

mikroskopisch findet fortwährend Teilchenbewegung statt!

Mittelwert klingt exponentiell ab der Geschw.

$\Leftrightarrow$ Im Mittel strebt das Teilchen einen ruhenden Zustand zu (da keine äußere Kraft ~~keine~~ da ist)