Versuch einer Zusammenfassung dieser Vorlesung

- Stochastische Prozesse:
  insbesondere Markov-Prozesse:

  vollständige Beschreibung der Dynamik durch Angabe der Wahrsch.

  $$P(x_n, t_n) \text{ und } P(x_n, t_n / x_{n-1}, t_{n-1})$$

  bed. Wahrsch, Übergangswahrsch.

$\rightarrow$ Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$\underset{\text{Endzustand}}{p(x_3, t_3} / \underset{\text{Anfangszustand}}{x_1, t_1)} = \int dx_2 \; p(x_3, t_3 / x_2 t_2) \, p(x_2 t_2 / x_1 t_1)$$

Integration über alle mögl. Zwischenzustände

Zeitentwicklung solcher Wahrsch.?

Taylorentwicklung in $\Delta t = t_i - t_{i-1}$

Pauli-Master-Gleichung:

Übergangsrate von x_2 nach x_3

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x_3\, t \,|\, x_1 t_1) = \int dx_2 \Big[W(x_3; x_2 t_2)\, p(x_2 t_2 \,|\, x_1 t_1) - W(x_2; x_3 t)\, p(x_3 t_3 \,|\, x_1 t_1) \Big]$$

Anfangszustand

Nach Integration über x_1 (Konkret: multiplizieren mit $p(x_1, t_1)$ und integrieren über x_1)

$\Rightarrow$ Master-Gl.: $$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \int dx' \Big[W(x; x' t)\, p(x', t) - W(x'; x, t)\, p(x,t) \Big]$$

Spezialfall Markov-Prozess:

Brown'sche Bewegung

nicht-überdämpfte Langevin-Gl.:

Zufallskraft

$$\dot{\underline{v}}(t) = -\gamma \underline{v}(t) + \underline{f}(t) \qquad \left(\gamma = \frac{\overbrace{6\pi\eta R}^{\text{Stokes'sche Reibung}}}{m} \right)$$

Für Systeme im Gleichgewicht gilt das FDT

Oder überdämpft: $\Rightarrow \dot{\underline{r}}(t) = \frac{1}{\gamma} \underline{f}(t)$

Zugehörige Wahrscheinlichkeitsgleichung: $\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) = D \nabla^2 P(\underline{r}, t)$

Diffusionsgleichung.

$$\langle (\Delta r(t))^2 \rangle \xrightarrow[t \to \infty]{} 6Dt$$

$\leftarrow$ gilt auch für wechselwirkende Systeme im Gleichgewicht!

(im überdämpften Fall gilt dies für alle t!)

Allgemeine Langevin-Gl.

$$\dot{x}_i(t) = h_i(\{x(t)\}, t) + \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\{x(t)\}, t)\, f_j(t)$$

$i = 1, \dots, M$

$f_j(t)$: stochast. Kraft

$D_{ij} = \text{const}$: additives Rauschen.

D_{ij} abhängig von $\underline{x}(t)$: multiplikatives Rauschen

Bei Integration dieser Gleichung tritt das Ito-Stratonovich-"Dilemma" auf:
unwichtig bei additivem Rauschen, aber sehr wichtig bei multiplikativem Rauschen!

<u>Kramers-Moyal-Koeffizient</u>

$$K^{(n)}_{i_1 \dots i_n}(\{x_i(t)\}, t)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \left\langle (x_{i_1}(t+\tau) - x_{i_1}(t)) \cdot \ldots \cdot (x_{i_n}(t+\tau) - x_{i_n}(t)) \right\rangle$$

bei festem Zustand $x(t)$

„Momente" von $\Delta x = x_{i_1}(t+\tau) - x_{i_1}(t)$ aus der stochast. Langevin-Gl.

Besonders wichtig: $K^{(1)}$, $K^{(2)}_{ij}$

Drift-koeffizient, Diffusionskoeffizient

Fokker-Planck-Gl.

Folgerung aus der (Pauli-)Master-Gl. für kleine ~~Sprü~~ Sprünge

(Taylorentw. von $W(x; x''; t)$ in $\Delta = x - x''$)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} K^{(1)}(x,t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K^{(2)}(x,t) \right] P(x,t)$$

$$= -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}$$

Grenz-Bedingung für Gleichgewicht: $J = 0 \Rightarrow$ Mikroreversibilität

$$W(x;x',t)\,P^{eq}(x')$$

$$= W(x';x,t)\,P^{eq}(x)$$

Spezialfall der FP-Gl.

für überdämpftes System mit Wechselwirkung

Langev.: $0 = -\gamma \dot{\underline{r}}_i + \frac{1}{m}\underline{F}_i + \underbrace{\underline{f}_i(t)}^{\text{Zufall}}$

$$\underline{F}_i = \sum_{j\neq i} \underline{F}_{ij} = -\sum_{j\neq i} \nabla_{\underline{r}_i} U(r_{ij})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{r}^N\},t) = D \sum_{i=1}^{N} \nabla_i \left(\nabla_i - \beta \underline{F}_i(\{\underline{r}^N\},t)\right) P(\{\underline{r}^N\},t)$$

Formale Integration über $N-1$ Teilchen

$\Rightarrow$ Gl. für die Zeitentwickl. der

Einteilchendichte

$$\rho(\underline{r}_1,t) = N \int d\underline{r}_2 \ldots \int d\underline{r}_N \, P(\{\underline{r}^N\},t)$$

enthält $\rho^{(2)}(\underline{r}_1,\underline{r}_2,t)$

„Hierarchieproblem"

Näherung ("Closure"): Dynam. Dichtefunktionaltheorie (adiabatisch)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho(r,t) = D\,\nabla\rho(r,t)\,\nabla\frac{\overbrace{\delta F[\rho]}^{\text{freie Energie}}}{\delta\rho(r,t)}$$

Dyn. DFT
ist Beispiel für eine
Theorie zur Dynamik von
Ordnungsparametern (Hohenberg-Halperin)

Mikroskop. Begründung zur Langevin-Gl.:
Projektionsoperator-Formalismus

$$\dot{A}(t) = iL\,A(t) \quad ; \quad iL = i\mathcal{P}L + \underbrace{(1-\mathcal{P})}_{Q}L$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}A(t) = i\underbrace{\Omega_A}_{\text{Frequenz-matrix}}A(t) + \underbrace{F_A(t)}_{\text{"Zufallskraft"}} - \underbrace{\int_0^t d\tau\, \underbrace{K(t-\tau)}_{\text{Memory-Funktion}}\, A(\tau)}_{\text{Nicht-Markov'scher Term}}$$

im Gleichgewicht:

$$K(t-\tau) \sim \langle F_A(t)\,F_A(0)\rangle$$