

7.3 Modellierung des einarmigen Schwimmers s. Folien

8. Die Brownsche Bewegung: DER stochastische Prozess

• Motivation:

- (i) Beispiel an dem Theorie der stochastischen Prozesse angedeutet wurde
- (ii) Illustration der Grundkonzepte, Details dann in Kap. 10 & 11

8.1 Historie

- 1827: Robert Brown: beobachtet Samen Körper in Wasser gelöst/suspendiert (unter Mikroskop)



→ irreguläre Bewegung
organischer Ursprung der Bewegung wurde ausgeschlossen

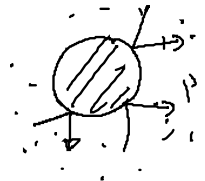
- 1905: erste Erklärung durch Einstein: Ann. Phys. (Leipzig) 17, 549 (1905)
 - über die von der molekular-kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in unlöslichen Flüssigkeiten suspendierten Teilchen

Einstein:

irreguläre Bewegung aufgrund von Stößen der Flüssigkeitsteilchen, die statistisch unabhängig voneinander erfolgen.

Parallel Beschreibung:
→ Kap. 8.3

- 1906: parallel Beschreibung durch Svedenski, finale Ausarbeitung der Konzepte
- 1906: alternative Theorie durch Langevin



8.2 Die Langevin-Gleichung: eine stochastische Differentialgleichung

- hier: erster Zugang, Ausarbeitung in Kap. 10 & 11
- Bewegungsgleichung für suspend. Teilchen (10):

$$m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + \underbrace{T(t)}_{\text{Zufalls/stochastische Kraft}} \quad (8.1)$$

Reibungs-
kraft
 $\gamma = 6\pi\eta a$

durch Stoß der Flüssigkeitsmoleküle
hier: thermischer Ursprung durch Wärmebewegung
der Fl. moleküle

statische Beschreibung und Stärke $T^2 \rightarrow$ Kap. 10

Verallgemeinerung: nicht thermischer Ursprung
 \rightarrow Kap. 11

Bsp: aktive Brownsche Teilchen
= Teilchen mit innerem Antrieb
& stochastische Kraft

- Berechnung von Mittelwert: $\langle \dots \rangle$

Mittelwert über verschiedene
Realisierungen von T^i
 \rightarrow unterschiedliche Teilchen-
trajektorien

(i) mittlerer Ort: $\langle x \rangle$

$$\langle (8.1) \rangle \rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\gamma \frac{d}{dt} \langle x \rangle + \underbrace{\langle T^i \rangle}_{=0} \quad (8.2)$$

= 0, da $T^i = \pm f$ gleich
wahrscheinlich

$$\boxed{\langle x \rangle = x_{\infty} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m} t})} \quad (8.3)$$

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

$$\boxed{\tau = \frac{m}{\gamma}} \quad (8.4)$$

... Impulsrelaxationszeit!

(ii) mittlere quadratische Verschiebung $\langle x^2 \rangle$:

Berechne: $\langle (R1)x \rangle \rightarrow m \langle \ddot{x} \rangle + \gamma \langle \dot{x} \rangle = \langle T'(4)x \rangle$

$$= \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - \langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 0$$

$T = \pm f$ gleich-wahrscheinlich, unabh. von x !

verwende: $\boxed{\frac{m}{2} \langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{2}} \quad (8.5)$

... Gleichverteilungssatz

\Rightarrow Info über "Stärke von T "

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

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

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

"Bewegung durch Impulsrelaxation"

$t \gg \tau \rightarrow$

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

... diffusive Bewegung!

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

... Diffusionskoeffizient = Einstein-Relation

Bsp: für Planktonkaries (D)

- Dissipation (γ)

- Thesen

• Absolut:

(1) Teilchen: Radius $a = 1 \mu\text{m}$, $\rho = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kg}}{\text{l}}$

in H_2O : $\eta = 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}$

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

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

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

8.3 Einstein's Zugang

- Betrachte viele voneinander unabhängige Teilchen:

Führe ein: (1D-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:

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

$$\text{Dann: } \boxed{f(x, t+\tau) dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f(x-\Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta}_{\text{Zahl der Teilchen (pro Längeneinheit), die in Zeit } \tau \text{ von } x-\Delta \text{ nach } x \text{ strecken!}}} \quad (8.12)$$

Bem: (i) Markov-Annahme:

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

(ii) (8.12) ... spezielle Form der Chapman-Kolmogorov-Gl. [s. Kap. 9]

(ii) verwende:

$$f(x, t+\tau) \stackrel{\text{Taylor}}{\approx} f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} + \dots$$

$$f(x-\Delta, t) = f(x, t) - \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots$$

} in (8.12)

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

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

... Diffusionsgleichung
 = spezielle Form der Fokker-Planck-Gl. [s. Kap. 11]
 " " " Smoluchowski-Gl. [s. Kap. 10]

(iv) Zusammenhang mit Lagrange-Zugang?
 Lösung für $f(x, 0) = n \delta(x)$: (n ... Gesamt-Teilchenzahl)

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt} \quad (8.15)$$

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

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