7.3 Modellierung des einarmigen Schwimmers

s. Folien

---

8. Die Brownsche Bewegung: DER stochastische Prozeß

• Motivation:

(i) Beispiel an dem Theorie der stochastischen Prozesse entwickelt wurde

(ii) Illustration der Grundkonzepte, Details dann in Kap. 10 & 11

8.1 Historie

• 1827: Robert Brown: beobachtet Samenkörper in Wasser gelöst/suspendiert (unter Mikroskop)

→ irreguläre Bewegung

organischer Ursprung der Bewegung wurde ausgeschlossen

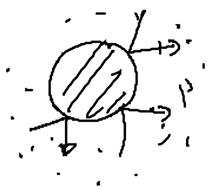
• 1905: erste Erklärung durch Einstein: Ann. Phys. (Leipzig) **17**, 549 (1905)

„Über die von der molekular-kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen"

Einstein: $\boxed{\text{irreguläre Bewegung aufgrund von Stößen der Flüssigkeitsmoleküle, die statistisch unabhängig voneinander erfolgen.}}$

theoretische Beschreibung:

→ Kap. 8.3



• 1906: parallele Beschreibung durch Smoluchowski, formale 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):

$$m\ddot{x} = -\underbrace{\gamma\dot{x}}_{\substack{\text{Reibungs-}\\ \text{kraft}\\ \gamma = 6\pi\eta a}} + \underbrace{\Gamma(t)}_{}\quad (8.1)$$

Zufalls/stochastische Kraft durch Stöße der Flüssigkeitsmoleküle

hier: thermischer Ursprung durch Wärmebewegung der Fl. moleküle

statistische Beschreibung und Stärke $\Gamma \longrightarrow$ Kap. 10

Verallgemeinerung: nicht thermischer Ursprung $\longrightarrow$ Kap. 11

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

- Berechnung von Mittelwerten: $\langle \ldots \rangle$

Mittelung über verschiedene Realisierungen von Γ $\longrightarrow$ unterschiedliche Teilchen-trajektorien

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

$$\langle (8.1) \rangle \longrightarrow m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -\gamma\frac{d}{dt}\langle x\rangle + \underbrace{\langle \Gamma \rangle}_{=0,\ \text{da } \Gamma = \pm f \text{ gleich wahrscheinlich}} \quad (8.2)$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle x\rangle = x_\infty\left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right)\\ &\text{mit } \langle x\rangle = \begin{cases} 0, & t = 0\\ x_\infty, & t\to\infty\end{cases}\end{aligned}} \quad (8.3)$$

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

... Impulsrelaxationszeit!

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

Berechne: $\langle (8.1)\, x \rangle \longrightarrow m \underbrace{\langle x \ddot{x} \rangle}_{= \frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}\langle x^2\rangle - \langle \dot{x}^2 \rangle} + \gamma \underbrace{\langle x \dot{x} \rangle}_{= \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle} = \underbrace{\langle \Gamma(t)\, x \rangle}_{=0}$

$=0$, $\Gamma = \pm f$ gleichwahrscheinlich, unabh. von x!

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

... Gleichverteilungssatz

$\hat{=}$ Info über „Stärke von Γ"

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

$$\longrightarrow \quad \langle x^2 \rangle = \underbrace{x_\infty^2 \left(1 - e^{-t/\tau}\right)}_{\text{Lsg. der homog. Gl}} + \underbrace{\frac{2 k_B T}{\gamma} t}_{\text{partikulare Lsg. von (8.6)}}$$

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

„Bewegung durch Impulsrelaxation"

$$t \gg \tau \longrightarrow \quad \boxed{\langle x^2 \rangle = 2 D t} \; (8.8) \quad \text{mit} \quad \boxed{D = \frac{k_B T}{\gamma}} \; (8.9)$$

... diffusive Bewegung!

... Diffusionskoeffizient
= Einstein-Relation

Bsp: für Fluktuations (D)
– Dissipations (γ)
– Theorem

· Abschätzung:

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

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

$$\longrightarrow \left.\begin{array}{l} m = 4 \cdot 10^{-15}\, kg \\ \gamma = 6\pi\eta a = 2 \cdot 10^{-8} \frac{kg}{s} \end{array}\right\} \longrightarrow \tau = \frac{m}{\gamma} \approx 2 \cdot 10^{-7} s$$

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

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

8.3 Einstein's Zugang

- Betrachte viele voneinander unabhängige Teilchen:

Führe ein: (1D-Behandlung)

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

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

(i) Führe ein:

$\phi(\Delta)\,d\Delta$ ... Wahrscheinlichkeit für Schritt der Länge aus $[\Delta, \Delta + d\Delta]$ im Zeitintervall τ

mit Normierung: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)\,d\Delta = 1$ (8.11)

Symmetrie: $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$

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

Bem: (i) Markov-Annahme:
$f(x,t+\tau)$ hängt nur von unmittelbarer Vergangenheit zur Zeit t ab, keine Gedächtnis für gesamten Zeitverlauf von f

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

(ii) verwende:

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

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

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

(iii) $\longrightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned}&\frac{\partial f}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\\ &\text{mit } D = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2}\,\phi(\Delta)\,d\Delta\end{aligned}} \qquad (8.14)$$

... Diffusionsgleichung

= 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)

$$\boxed{\begin{aligned}&f(x,t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{-x^2/4Dt}\\ &\text{mit 2. Moment: } \langle x^2\rangle = \frac{1}{n}\int x^2 f(x,t)\,dx\\ &\qquad\qquad = 2Dt\end{aligned}} \qquad (8.15)$$

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