2. Nicht-überdämpfte Bewegung:

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

$$\rightarrow \quad K_i^{(1)} = -\gamma v_i \quad ; \quad K_i^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} d_{ij}$$

Beachte
Die dynamischen Variablen sind jetzt
$x_i(t) \rightarrow v_i(t)$
$i = 1,2,3!$

$\Rightarrow$ Fokker-Planck-Gleichung für die (einteilige) Wahrsch. dichte:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{v},t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial v_i}\left(-\gamma v_i P(\underline{v},t)\right) + \frac{\Gamma}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial v_i}\frac{\partial}{\partial v_j} d_{ij} P(\underline{v},t)$$

$$= \gamma \nabla_{\underline{v}} \left(\underline{v} P(\underline{v},t)\right) + \frac{\Gamma}{2} \nabla_{\underline{v}}^2 P(\underline{v},t)$$

Umschreiben als Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{v},t) + \sum_i \frac{\partial J_i}{\partial v_i} = 0$$

mit $J_i = -\gamma v_i P(\underline{v},t) - \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t)$

Lösung
$\rightarrow$ Übung

Stationäre Lösung

$$J_i = 0 \qquad (s.\ I.9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t) = -\frac{2}{\Gamma} \gamma\, v_i\, P(\underline{v},t)$$

benutze noch FDT: $\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t) = -\frac{m}{k_B T} v_i\, P(\underline{v},t)$$

Ansatz:

$$P(\underline{v},t) = A\, e^{-\frac{m}{2k_B T}\sum_{j=1}^{3} v_j^2}$$

Konstante A wird festgelegt durch die Normierungsbed. $\int d\underline{v}\, P(\underline{v},t) \stackrel{!}{=} 1$

$$\Rightarrow \boxed{P(\underline{v},t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}}^{\,3} e^{-\frac{m}{2k_B T} v^2}}$$

Das ist die gewöhnliche Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung!

3. Bewegung im externen Potential mit Reibungskraft und Rauschen (1-Dim.)

$$\dot{v}(t) = -\gamma v(t) + \frac{1}{m} F(x,t) + f(t)$$

$$\text{mit } F(x,t) = -U^{ext}(x,t)$$

externes Potential

(Konservative) Kraft

Beachte

1) Es wird also implizit angenommen, daß sich die konservative Kraft nicht auf die Form des Rausch- oder Reibungskraft auswirkt!

→ es gilt nach wie vor:

$$\langle f(t) f(t') \rangle = \Gamma \delta(t-t')$$

2) Durch die Anwesenheit der konservativen (d.h., x-abhängigen) Kraft tritt jetzt der Ort x als zusätzliche dyn. Variable auf!

Zugehörige BWGL.

$$\dot{x}(t) = v(t)$$

→ Auch die Fokker-Planck-Gl. involviert sowohl v als auch x !!

Kramers-Moyal-Koeffizienten (siehe auch Beispiel 2)

$$K_v^{(1)} = -\gamma v + \frac{1}{m} F(x,t)$$

$$K_x^{(1)} = v$$

$$K_{vv}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{FDT}}}{=} \frac{\gamma k_B T}{m} \quad ; \quad K_{xx}^{(2)} = 0 \; ; \; K_{xv}^{(2)} = K_{vx}^{(2)} = 0$$

⇒ Fokker-Planck-Gl.:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,v,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} \cdot v - \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{m} F(x,t) - \gamma v \right) + \frac{\gamma k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(x,v,t)$$

Diese Gleichung wird häufig "Kramers-Gleichung" oder auch "Kramers-Klein-Gleichung" genannt

4) Überdämpfte Bewegung im Potential (s.a. Übung!)
(hier in 3D)

(d.h. $m\ddot{\underline{r}}(t) \approx 0$

$$\rightarrow \dot{\underline{r}}(t) = \gamma^{-1} \underline{f}(t) + (\gamma m)^{-1} \underline{F}(\underline{r}, t)$$

Konservative Kraft

→ Die einzige dyn. Variable ist wieder $\underline{r}(t)$!
(bzw. $r_i(t)$, $i = 1,2,3$)

KM-Koeffizienten (siehe auch Beispiel 1)

$K_i^{(1)} = (\gamma m)^{-1} F_i(\underline{r}, t)$; $K_{ij}^{(2)} = \frac{\pi}{2} \gamma^{-2} \delta_{ij}$
(beachte: $\frac{k_B T}{\gamma m} = D$) $= D\, \delta_{ij}$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) = D \nabla \left(\nabla - \frac{1}{\gamma m D} \underline{F}(\underline{r}, t) \right) P(\underline{r}, t)$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) = D \nabla \left(\nabla - \frac{1}{k_B T} \underline{F}(\underline{r}, t) \right) P(\underline{r}, t)}$$

„Smoluchowski-Gleichung"

→ Sehr wichtige Gleichung für Kolloidsysteme, da man hier typischerweise den überdämpften Fall vorliegen hat!