

$$m \dot{\underline{v}} = \underbrace{-\gamma \underline{v}}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\underline{f}(t)}_{\text{Zufall (Rauschen)}}$$

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

$$\dot{\underline{v}} = -\gamma \underline{v} + \frac{1}{m} \underline{f}(t) \quad \langle \underline{f}_i(t) \underline{f}_j(t') \rangle = \Gamma \delta_{ij} \delta(t-t')$$

quadratisch Gauß des Rauschens

$$\langle \underline{v}(t) \underline{v}(t) \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 3 \frac{\pi}{2\gamma}$$

Equipartition

$$\text{Sonder: } \langle \underline{v}(t) \underline{v}(t) \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 3 \frac{k_B T}{m}$$

$$\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}$$

Fluktuations-Dissipations Theorem (FDT)

Reibung und Zufall sind nicht unabhängig, sondern gekoppelt!

$$\langle (\Delta \underline{v}(t))^2 \rangle = \langle (\underline{v}(t) - \underline{v}(0))^2 \rangle$$

mittleres Verschiebungsquadrat

$$= 3 \cdot 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left(t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right)$$

Kurze Zeiten:

$$\langle (\Delta \underline{v}(t))^2 \rangle \approx 3 \frac{k_B T}{m} t^2 + O(t^3)$$

ballistisch!

lange Zeiten:

$$\langle (\Delta \underline{v}(t))^2 \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 6 \frac{k_B T}{m\gamma} t = 6 D t$$

diffusiver Prozess!

IV 3. Überdämpfte Lager-Dynamik

$$\textcircled{1} \quad \boxed{\dot{v} = -\gamma v + \frac{f}{Z_{\text{Fall}}}}$$
nicht-überdämpfte Lager sind
 $\Rightarrow \langle v(t) v(0) \rangle = \frac{3kT}{m} e^{-\gamma t}$

Die Relaxationszeit für \dot{v} ist $\tau = 1/\gamma$
 \Rightarrow Relaxationszeit $\tau = 1/\gamma$
 $= \frac{3kT}{m} e^{-t/\tau}$

\Rightarrow Für Zeiten $t \gg \tau$ kann der Term \dot{v} in $\textcircled{1}$ vernachlässigt werden !!

Setze $\boxed{0 = -\gamma v + \frac{f}{Z_{\text{Fall}}}}$
überdämpfte Lager-Gleichung

(Brauch' sie Dynamik)

γ anders ausgedrückt
 $\gamma = 6 \pi R \eta / m$
 $\gg \gg$

Viskosität

\Rightarrow System ist dominiert durch Reibung
 \Rightarrow mechanische Kräfte können vernachlässigt werden

$\boxed{\gamma \dot{r} = \frac{f(t)}{Z_{\text{Fall}}}}$
**

• dynamische Variable ist jetzt $r(t)$ (Statt $v(t)$ wie in der nicht-überdämpften Gleichung)
 (relevant)

• $\langle \ddot{x} \rangle$ ist ein sogenannter "Wiener Prozess"

(benannt nach dem Mathematiker Norbert Wiener)

• \ddot{x} hier: $\langle \ddot{x} \rangle$ behält ein einzelnes Kollisionsereignis im Lösungsweg ohne Integral effekt:

• Implizit: Geschwindigkeit \dot{x} eines Teilchens bleibt konstant (\Rightarrow keine Geschwindigkeits-Kontinuitätsfunktion!)

• aber: mittleres Verschiebungsquadrat
integriert $\langle \ddot{x} \rangle$ formal: $\underline{v}(t) - \underline{v}(0) = \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau' \underline{f}(\tau')$

$$\langle (\underline{v}(t) - \underline{v}(0))^2 \rangle = \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t d\tau' \int_0^t d\tau'' \underbrace{\langle \underline{f}(\tau') \cdot \underline{f}(\tau'') \rangle}_{3T' \delta(\tau' - \tau'')}$$

$$\langle \underline{f}(\tau') \cdot \underline{f}(\tau'') \rangle = T' \delta_{\tau_0} \delta(\tau' - \tau'')$$

$$= \frac{3T'}{\gamma^2} \int_0^t d\tau' \int_0^t d\tau'' \delta(\tau' - \tau'')$$

$$= \frac{1}{\gamma^2} 3T' t$$

$$= 6 \frac{k_B T}{\gamma m} t = \underline{\underline{6 D t}}$$

Beacht:

In Kolloidssystemen sind ~~gitter~~ die Teilchen-Trajektorien
unmittelbar experimentell zugänglich
→ mittleren Verschiebungsquadrat ist messbar!

Allgemeine Lagrange-Gleichung mit einer ^{dynamischen} Variable x
↓
variable

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

$\underline{x} = x_1, \dots, x_M$

$$\underline{x}(t) = x_1, \dots, x_M$$

speziell: nicht-überdämpfte Lagrange-Gleichung $\dot{v} = -\delta v + \xi$

$$\underline{x} \longrightarrow \underline{v}(t)$$

$$\underline{h} \longrightarrow -\delta \underline{v}, \quad D_{ij} \sim d_{ij}$$

Falls die Matrix D_{ij} von $\underline{x}(t)$ abhängt:
multiplikatives Rauschen!

IV.4. Fokker-Planck- und Smoluchowski-Gleichung

Frage: Wie sieht ein verallgemeinertes Diffusionsgleichung aus für wechselwirkende Vollgittersysteme?

(auf dem Gitterlevel:

$$\dot{v}_i = -\gamma v_i + f_i(t) + F_i$$

Tatken-Index
 $i = 1, \dots, N$

mit $F_i = -\nabla_i U(\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_N)$
 Wechselwirkungsenergie

Suche also Gleichung für eine Wahrscheinlichkeitsdichte!
 (also: Teilchen \rightarrow Felder)

Ausgangspunkt:

Master-Gleichung: zeitl. Veränderung einer Wahrscheinlichkeitsdichte oder eines solchen diskreten Wahrscheinlichkeitsraums

$$\textcircled{*} \quad \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int dx' \left[\overset{\text{Gewinnen}}{W(x; x', t)} P(x', t) - \overset{\text{Verluste}}{W(x'; x, t)} P(x, t) \right]$$

Kontinuierliche Variable,
 z.B. Ort eines Teilchens
 in 1 Dim.

W : Übergangswahrsch.

$W(x; x', t)$: Übergangswahrsch.
 von Zustand x' zu x

$W(x'; x, t)$: Übergangswahrsch.
 von Zustand x nach x'

Prozesse von $x' \rightarrow x$

Prozess von $x \rightarrow x'$

Resultat: (*) ist implizit der Nachbar-Charakter der darauffolgenden Störf. Prozesse!

Annahme

Die Übergangswahrsch. W sind nur dann ~~total~~ unklar hier, wenn x' sehr dicht an x ist

$\Leftrightarrow \Delta = x - x'$ klein

\Rightarrow dann kann man die Übergangswahrsch. nach Δ entwickeln

\Rightarrow "Kramers-Moyal-Entwicklung"

Resultat

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n K^{(n)}(x,t) P(x,t) \quad (**)$$

$$K^{(n)}(x,t) = \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} du u^n W(x+u; x,t)$$

Kramers-Moyal-Koeffizient n-ter Ordnung

$u = x - x' = \Delta$

man kann ~~weiter~~ zeigen: Die $K^{(n)}$ sind äquivalent zu der

Größe $K^{(n)}(x,t) \approx \frac{1}{n!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle (x(t+\tau) - x(t))^n \rangle$
 (allgemein) berechnen aus einer Lagrange-Gleichung

Typischerweise betrachtet man in $(*)$ nur die ersten beiden Terme auf der rechten Seite:

$$(n=1, 2)$$

Begründung: Für Systeme, in denen die Übergangswahrsch. sehr schnell mit 0 abfällt, gilt

$$k^{(n \geq 3)} \approx 0$$

- Es gilt $k^{(n \geq 3)} \approx 0$ falls die Zufallsstöße in der Lagrange-Gleichung Gauss-verteilt sind!

aus $(*)$

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

Fokker-Planck-Gleichung für ein System mit einer Variable!

viele Variablen:

\underline{x} mit $x_i, i=1, \dots, M$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} P(\underline{x}, t) = \left[-\sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial x_i} k_i^{(1)}(\underline{x}, t) + \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} k_{ij}^{(2)}(\underline{x}, t) \right] P(\underline{x}, t)$$

- Der Ausdruck in den eckigen Klammern heißt 'Focke-Planck-Operate'

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} P = \hat{L}_{FP} P$$

mit $\hat{L}_{FP} = \left[-\sum_{i=1}^M \dots \right]$

- Führe einen Strom ein

$$J_i = k_i^{(0)} P - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} k_j^{(0)} P$$

⇒

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} P(x, \mathcal{E}) + \underbrace{\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i}_{P \cdot \underline{J}} = 0$$

"Kontinuitätsgleichung"

drückt die Erhaltung der Gesamtenergie aus!

$$\int dx \mathcal{K}(x, \mathcal{E}) = 1$$