

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 Samen körner in Wasser gelöst/suspendiert (unter Mikroskop)

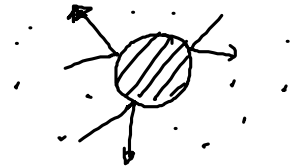


→ irreguläre Bewegung organischer Ursprung der Bewegung wurde ausgeschlossen.

1905: erste Erklärung durch Einstein: Ann. Phys. (Leipzig) 17, 549 (1905)
"Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhender Flüssigkeit suspendierten Teilchen"

Einstein: irreguläre Bewegung aufgrund von Stößen der Flüssigkeitsmoleküle, die statistisch unabhängig voneinander erfolgen.

theoretische Beschreibung
→ Kap. 8.3



1906: parallele Beschreibung durch Smoludowski, 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 (1D):

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

$\gamma = 6\pi\eta a$
durch Stöße der Flüssigkeitsmoleküle

hier: thermischer Ursprung durch die Wärmebewegung der Fl. moleküle

statistische Beschreibung und Stärke von T → Kap. 10

Verallgemeinerung: nicht Hermitescher Ursprung
 → Kap. 11

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

• Berechnung von Mittelwerten: $\langle \dots \rangle$
 Mittelung über verschiedene Realisierungen
 von $T \rightarrow$ unterschiedliche Teilchen-
 trajektorien

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

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

$\rightarrow \langle x \rangle = x_\infty (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})$ (8.3)
 mit $\langle x \rangle = \begin{cases} 0, & t=0 \\ x_\infty, & t \rightarrow \infty \end{cases}$

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

... Impulsrelaxationszeit!

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

Berechne: $\langle (8.1)x \rangle \rightarrow m \langle \ddot{x} \rangle + \gamma \langle \dot{x} \rangle = \langle T(t)x \rangle$
 $= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle$
 $= 0$
 $T = \pm f$ gleichwahrscheinlich,
 unabhängig von x !

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

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

... Gleichverteilungssatz

≡ Info über „Stärke von T“

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

$$\rightarrow \langle x^2 \rangle = \underbrace{x_{\infty}^2 (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})}_{\text{Lsg. der homogenen Gl.}} + \underbrace{\frac{2k_B T}{\eta} t}_{\text{partikuläre Lsg. von (8.6)}} \quad (8.7)$$

Lsg. der homogenen Gl. 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“

$t \gg \tau$
→

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

... diffusive Bewegung!

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

... Einsteinrelation

Bsp: für Fluktuationen (D)

- Dissipation (η)

- Theorem

• Abschätzung:

(1) Teilchen: Radius $a = 1 \mu\text{m}$, $\rho = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kg}}{\ell}$, in H_2O : $\eta = 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}$

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

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

$$t = 100 \text{ s} \rightarrow \sqrt{\langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle} = 10 \mu\text{m}! \quad [\text{im Mikroskop beobachtbar!}]$$

8.3 Einstein's Zugang

• Betrachte viele von einander 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:

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

mit Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Delta) d\Delta = 1$

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

(8.11)

Damit:

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

Zahl der Teilchen (pro Längeneinheit), die in Zeit τ von $x-\Delta$ nach x streifen!

Bem.: (i) Markov-Annahme:

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

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

(ii) verwende:

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

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

... Beispiel einer Kramers-Moyal-Entw.

[s. Kap. 11]

(iii) \rightarrow

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

... Diffusionsgl.

= 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-Teilzahl)

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

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

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

9. Einige Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie

• Details für Kap. 9.1/9.2: s. Stat. Physik I, SS09, Kap 3
[Ehreide: Vorlesung??]

9.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

- Def: $\left. \begin{array}{l} \text{stochastische} \\ \text{Zufalls-} \end{array} \right\} \text{Variable } x \text{ gegeben durch}$ (9.1)

(i) Wertebereich
(ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

- kontinuierliche Verteilung:

$$\begin{aligned} x \in S &= [x_1, x_2] \\ P(x) dx &\dots \text{Wahrscheinlichkeit für } [x, x+dx] \\ P(x) &\dots \text{Wahrscheinlichkeitsdichte (funktion)} \end{aligned} \quad (9.2)$$
$$\int_{x_1}^{x_2} P(x) dx = 1 \dots \text{Normierung}$$

- Mittel-/Erwartungswert einer Observablen $f(x)$:

$$\langle f \rangle = \int f(x) P(x) dx \quad (9.3)$$

Wahrscheinl. mit der $f(x)$ vor kommt!