Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Maximilian Schmitt (Sprechstunde: Mo 14:00-15:00 in EW 708)

10. Übungsblatt – Statistische Physik des Nichtgleichgewichts

Abgabe/Vorrechnen: Mi. 25.06.2014 zu Beginn der Übung

S Aufgabe 30 (4 Punkte): *Kugelwettlauf*

In einem Kugelwettrennen werden Kugeln in einem mit Glycerin gefüllten Tank gesetzt. Gewonnen hat, wer am schnellsten eine Kugel auf den Grund des Tanks setzt.

(a) Kandidat 1 setzt auf eine einzelne Kugel. Berechnen Sie die Sinkgeschwindigkeit.

(b) Kandidat 2 setzt 2 Kugeln nebeneinander (Mittelpunktsabstand der Kugeln jeweils der dreifache Kugelradius). Berechnen Sie die Sinkgeschwindigkeit.

(c) Kandidat 3 setzt 2 Kugeln übereinander (Mittelpunktsabstand der Kugeln jeweils der dreifache Kugelradius). Berechnen Sie die Sinkgeschwindigkeit.

Hinweis: Nutzen Sie die Rotne-Prager-Näherung für die hydrodynamische Wechselwirkung translatierender Kugeln in hochviskosen Flüssigkeiten. Danach gilt für die Geschwindigkeit einer Kugel bei $\mathbf{r}_i$ im Strömungsfeld $N-1$ translatierender Kugeln bei $\mathbf{r}_j$:

$$\mathbf{v}_i = \mu_0 \mathbf{F}_i + \mu_0 \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \left[\frac{3}{4}\frac{a}{d}\left(\mathbb{1} + \frac{\mathbf{d}_{ji}\otimes\mathbf{d}_{ji}}{d^2}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{a}{d}\right)^3 \left(\mathbb{1} - 3\frac{\mathbf{d}_{ji}\otimes\mathbf{d}_{ji}}{d^2}\right)\right]\mathbf{F}_j\,, \tag{6.17}$$

wobei $\mathbf{d}_{ji} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ und $d = |\mathbf{d}_{ji}|$.

M Aufgabe 31: *Zufallsgeher auf kubischem Gitter*

(a) Betrachten Sie ein Teilchen, das in jedem Zeitschritt Δt einen Sprung der Länge a in zufälliger Richtung auf einem kubischen Gitter macht. Sei $p(\mathbf{r}, t)$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t am Ort $\mathbf{r}$ auf dem Gitter zu finden. Leiten Sie eine Diffusionsgleichung für $p(\mathbf{r}, t)$ her, in dem Sie in dem Ausdruck

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{p(\mathbf{r}, t+\Delta t) - p(\mathbf{r}, t)}{\Delta t}$$

$p(\mathbf{r}, t+\Delta t)$ als Funktion aller $p(\tilde{\mathbf{r}}, t)$ mit $\tilde{\mathbf{r}} \neq \mathbf{r}$ darstellen und Taylor-entwickeln. Was ist die Diffusionskonstante D? Was erhält man auf einem 2D-Gitter, was auf einem 1D-Gitter?

(b) Wie lautet die Fundamentallösung $p(\mathbf{r}, t)$? Was erhält man für den mittleren quadratischen Abstand $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ des Teilchens vom Ursprung?

(c) Betrachten Sie nun eine Polymerkette, die aus N Segmenten der Länge L_{seg} besteht. Die Glieder sollen mit rechten Winkeln verbunden sein. Was erhalten Sie für den mittleren quadratischen End-zu-End-Abstand $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ der Polymerkette?

M **Aufgabe 32**: *Eigenfunktion des Laplaceoperators auf der Einheitskugel*
Sei $\mathbf{r}$ ein normierter Ortsvektor in Kugelkoordinaten, d.h. $\mathbf{r} = \mathbf{e}_r$. Berechnen Sie $\nabla^2_\Omega \mathbf{r}$, wobei ∇^2_Ω der Winkelanteil des ∇^2 Operators in Kugelkoordinaten ist.

S **Aufgabe 33 (6 Punkte):** *Persistenzlänge*

(a) Sei $\mathbf{t}(s)$ der normierte Tangentialvektor eines Polymers an der Stelle s entlang der Polymerkontur. Zeigen Sie, dass für die Korrelationsfunktion

$$\langle \mathbf{t}(s) \cdot \mathbf{t}(s') \rangle = e^{-|s-s'|/l_p} \;, \tag{7.3}$$

gilt, mit Persistenzlänge l_p.

Stellen Sie wieder eine Analogie zu einem Zufallsgeher her: Der Richtungsvektor $\mathbf{e}(t)$ eines kontinuierlichen Zufallsgehers führt Rotationsdiffusion auf einer Kugel aus, d.h. die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\Omega, t)$ von $\mathbf{e}(t) = \mathbf{e}_r(t)$ gehorcht der Diffusionsgleichung in Kugelkoordinaten:

$$\partial_t p(\Omega, t|\Omega', t') = D_r \nabla^2_\Omega p(\Omega, t|\Omega', t') \;, \quad t' \leq t \;, \tag{1}$$

mit Rotationsdiffusionskonstante D_r. Ω ist stellvertretend für $\{\varphi, \vartheta\}$ und ∇^2_Ω ist demnach der Winkelanteil des ∇^2 Operators in Kugelkoordinaten. Berechnen Sie die Korrelationsfunktion $\langle \mathbf{e}(t) \cdot \mathbf{e}(t') \rangle$. Wie hängt die Rotationsdiffusionszeit $\tau_r \equiv (2D_r)^{-1}$ mit der Persistenzlänge l_p zusammen?

Hinweis: Die bedingte Wahrscheinlichkeit $p(x, t|x', t')$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass x zur Zeit t eintritt, wenn x' zur Zeit t' auf jeden Fall eintritt. Damit gilt für $p(x, t; x', t') \equiv p(x, t) \cap p(x', t')$, dass $p(x, t; x', t') = p(x, t|x', t')p(x', t')$.

Hinweis: Die Korrelationsfunktion ist definiert als:

$$\langle x(t)\, x(t') \rangle = \iint x\, x'\, p(x, t; x', t')\, dx dx' \;. \tag{9.16}$$

(b) Bestimmen Sie den mittleren quadratischen End-zu-End-Abstand $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ eines semiflexiblen Polymers ohne äußere Kraft. Wie lässt sich das Modell des kontinuierlichen semiflexiblen Polymers auf das diskrete Modell aus Aufgabe 31 übertragen?