nicht-überdämpfter Fall:

$$\dot{\underline{r}} = \underline{v}$$

Langevin-Gl.

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

überdämpfter Fall:

$$\gamma = \frac{6\pi R\eta}{m}$$

$$0 = -\gamma \underline{v} + \frac{1}{m} \underline{f}(t)$$

$$\gamma \dot{\underline{r}} = \frac{1}{m} \underline{f}(t)$$

→ nur der Ort ist dyn. Variable

allg.:

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

$\underline{x}(t)$: Vektor, der alle dynamische Variable enthält

Fokker-Planck-Gleichung:

BWGL für die zugehörige Wahrsch.dichte

$P(\{\underline{x}\}, t)$

Übergang durch Kramers-Moyal-Entwicklung

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}\},t) = \hat{L}_{FP} P(\{\underline{x}\},t)} \quad \text{FP-Gleichung}$$

$$\hat{L}_{FP} = -\sum_{i=1}^{M} \frac{\partial}{\partial x_i} K_i^{(1)}(\{\underline{x}\},t)$$
$$+ \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K_{ij}^{(2)}(\{\underline{x}\},t)) P(\{\underline{x}\},t)$$

oder mit Strom: $J_i = K_i^{(1)} P - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} K_{ij}^{(2)} P$

Komponenten der "Strom-Vektors"

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}\},t) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i = 0$$

Wie lautet die FP-Gleichung zu einer Langevin-Gl. ganz konkret?

Definition der Kramers-Moyal-Koeff.

$$K^{(n)}_{i_1 i_2 \ldots i_n}(\{\underline{x}(t)\},t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \langle (x_{i_1}(t+\tau) - x_{i_1}(t)) \cdot (x_{i_2}(t+\tau) - x_{i_2}(t)) \cdot \ldots \cdot (x_{i_n}(t+\tau) - x_{i_n}(t)) \rangle$$

berechenbar aus der (allgemeinen) Langevin-Gleichung!

benutze:

$$x_i(t+\tau) - x_i(t) = \int_t^{t+\tau} dt' \left[h_i(\{\underline{x}(t')\},t') + \sum_j D_{ij}(\{\underline{x}(t')\},t') f_j(t') \right]$$

stochastische Integration!

Ergebnis

$$K_i^{(1)} = h_i(\{\underline{x}(t)\},t) + \overbrace{\frac{\Pi}{2} \sum_{jk} \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_k}(\{\underline{x}(t)\},t) D_{kj}(\{\underline{x}(t)\},t)}^{\text{rauschinduzierter Drift}}$$

(nach Stratonovich-Regel)

nur ~~dann~~ ungleich Null für multiplikativen Rauschen (meistens hat man einfach additives Rauschen)

Beispiel:
nicht-überdämpfte Langevin-Gl. für 1 Brown'sches Teilchen in 1 Dim

$$(*) \quad \left.\begin{aligned} \dot{x} &= v \\ \dot{v} &= -\gamma v + \frac{1}{m} f \end{aligned}\right\} \quad \text{formal } \underline{x}(t) = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$$

$$h_x = v$$
$$h_v = -\gamma v$$

$$\Rightarrow K_x^{(1)} = v, \quad K_v^{(1)} = -\gamma v$$

Zweiter Kramers Moyal-Koeff.

$$K_{ij}^{(2)}(\{\underline{x}(t)\},t) = \frac{\Gamma}{2}\sum_k D_{ik}(\{\underline{x}(t)\},t)D_{k\ell}(\{\underline{x}(t)\},t)$$

im Beispiel (*) : $K_{xx}=0$, $K_{xv}=0$, $K_{vx}=0$

$$K_{vv} = \frac{1}{m}$$

Zurück zur Fokker-Planck-Gleichung

Fokus: 1 Teilchen in 1 Dimension

überdämpfte Bewegung, kein externes Potential

$$0 = -\gamma v + \frac{1}{m} f \implies \gamma \dot{x} = \frac{1}{m} f$$

$$\dot{x} = \frac{1}{m\gamma} f$$

$$h_x = 0 \longrightarrow K_x^{(1)} = 0$$

$$D_{xx} = \frac{1}{m\gamma} \implies K_{xx}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{m^2\gamma^2}$$

$$= \gamma k_B T m \frac{1}{\gamma^2 m^2} = \frac{k_B T}{\gamma m} = D$$

Einsetzen in den Ausdruck für die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \hat{L}_{FP} P$$

$$\hat{L}_{FP} = -\frac{\partial}{\partial x} K_x^{(1)} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_{xx}^{(2)}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)}$$

bekannte Diffusionsgleichung!

<u>Anderes Beispiel</u>:

nicht-überdämpftes Teilchen in einem externen Potential

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m} \overset{\text{Zufall}}{f} + \frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} U(x)\right)$$

$$\underline{x}(t) = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$$

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

$$K_v^{(1)} = -\gamma v + \frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} U(x)\right)$$

$$K_{xx}^{(2)} = 0 \; , \quad K_{vv}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} \cdot \frac{1}{m^2} \; , \quad K_{xv}^{(2)} = K_{vx}^{(2)} = 0$$

zugehörige FP-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,v,t) = \Big[-\frac{\partial}{\partial x} v - \frac{\partial}{\partial v}\Big(\frac{1}{m}\Big(-\frac{\partial u}{\partial x}\Big) - \gamma v\Big) + \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{m^2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\Big] P(x,v,t)$$

Stationäre Lösung einer Fokker-Planck-Gleichung

betrachte System mit einer dyn. Variablen x

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) + \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = 0$$

$$\text{mit } J(x,t) \overset{(*)}{=} \Big(K^{(1)}(x) - \frac{\partial}{\partial x} K^{(2)}(x)\Big) P(x,t)$$

betrachte nun das System im thermische Gleichgewicht

$$J(x,t) = 0 \quad !$$

(schwächer: $\frac{\partial J}{\partial x} = 0$: stationärer Fall

aus $(*)$: $K^{(1)}(x) P^{eq}(x) = \frac{\partial}{\partial x}\Big(K^{(2)}(x) P^{eq}(x)\Big)$

equilibrium

$$\frac{K^{(1)}(x)}{K^{(2)}(x)} K^{(2)}(x) P^{eq}(x) = \frac{\partial}{\partial x}\left(K^{(2)}(x) P^{eq}(x)\right)$$

$$\Rightarrow K^{(2)}(x) P^{eq}(x) = \alpha\, e^{\int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}}$$

$$P^{eq}(x) = \frac{\alpha}{K^{(2)}(x)}\, e^{\int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}}$$

$$= \alpha\, e^{-\Phi(x)}$$

$$\text{mit } \Phi(x) = \ln K^{(2)}(x) - \int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}$$

Beispiel

1 nicht-überdämpftes Teilchen, kein äußeres Potential

relevante dyn. Variable: v

$$K^{(1)} = -\gamma v, \quad K^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{m^2}$$

$$\Rightarrow \Phi(v) = \ln\frac{\Gamma}{2m^2} - \int_c^v dv' \frac{(-\gamma v')}{\frac{\Gamma}{2m^2}}$$

$$= \ldots = \text{const} + \frac{\gamma m^2}{\Gamma} v^2$$

$$= \text{const} + \frac{m}{2 k_B T} v^2$$

$$\Longrightarrow \boxed{P^{eq}(v) \sim e^{-\frac{m}{2 k_B T} v^2}}$$

Maxwell-Boltzmann-Verteilung!

IV. 4. Fokker-Planck-Gleichung (Smoluchowski-Gleichung) für ein Vielteilchensystem aus wechselwirkenden, überdämpften Kolloiden

Langevin-Gl.:

$$\underset{\text{}}{\ddot{\underline{r}}_i} = \underbrace{-\gamma \dot{\underline{r}}_i}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\frac{1}{m} \underline{f}_i(t)}_{\text{Zufall}} + \underbrace{\frac{1}{m} \underline{F}_i(\{\underline{r}^N\}, t)}_{\text{Konservative Kräfte}}$$

$i = 1, \ldots, N$

$$\left(-\nabla_{\underline{r}_i} U(\{\underline{r}^N\}, t)\right)$$

überdämpfter Fall:

$$\ddot{\underline{r}}_i \approx 0$$

$$\boxed{\dot{\underline{r}}_i = \frac{1}{\gamma m} \underline{f}_i(t) - \frac{1}{\gamma m} \nabla_{\underline{r}_i} U(\{\underline{r}^N\}, t)}$$

Annahme:

Keine hydrodyn. Wechselwirkungen, d.h. Strömungsfeld um Kolloid i ist unbeeinflußt von der Bewegung von Kolloid j