

English Summary:

Autocorrelation fun. $G(\tau) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle$

spectral power density $S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |\tilde{x}(\omega, T)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i\omega\tau} G(\tau)$

1.3 Chapman-Kolmogorov eq.

continuous time: $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p(x, t+\Delta t | z, t)}{\Delta t} = W(x|z, t)$ transition prob. per unit time

1st moment (drift) of $p(x, t+\Delta t | z, t)$: $A_i(z, t)$

2nd moment (diffusion matrix): $B_{ij}(z, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z, t | y, t') = - \left\{ \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z, t) p(z, t | y, t')] + \sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z, t) p(z, t | y, t')] \right\} \textcircled{1}$$

$$+ \int dx [W(x|z, t) p(x, t | y, t') - W(z|z, t) p(z, t | y, t')] \textcircled{2}$$

differential Chapman-Kolmogorov eq.

① Fokker-Planck eq. (diffusion + drift, continuous)

② Master eq. (jump processes, discontinuous x)

(b) Diffusions-Prozesse (kontinuierlich)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z, t | \dots) = \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z, t) p(z, t | \dots)]$$

Diffusionsmatrix B_{ij} ($B_{ij} = B_{ji}$ pos. semidefinit)

z.B. 1-dim., $\frac{1}{2} B_{ij} = D$ (Diff.konst.)

$$\frac{\partial}{\partial t} p = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} p \text{ (Diffusionsgl.)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \text{div } j = 0$$

Lösung für Anfangswert $p(z, t | y, t) = \delta(z-y)$ und kleine Δt : $(j = -D \nabla n)$

$$p(z, t+\Delta t | y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2D\Delta t}} \exp \left\{ -\frac{(z-y)^2}{4D\Delta t} \right\}$$



Gaussverteilung mit Varianz $\sigma^2 = 2D\Delta t$ und Mittelwert y

(c) Drift (kontinuierlich)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z, t | \dots) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z, t) p(z, t | \dots)]$$

Liouville-Gl. der klass. Mechanik (konservativ)

mit Drift-Vektor $A_i(z, t)$ (Kraft oder Feld)

$\hat{=}$ determinist. Bewegung eines Teilchens

$$\dot{x}(t) = A(x(t)) \quad \text{mit} \quad x(t_0) = y$$

$\Rightarrow p(z, t | y, t_0) = \delta(z - x(t))$ ist Lösung der Liouville-Gl.

zu Anfangzeit $p(z, t_0 | y, t_0) = \delta(z - y)$

Beweis (1-dim):

$$\text{R.S.: } - \frac{\partial}{\partial z} [A(z) \delta(z - x(t))]$$

$$= - \frac{\partial}{\partial z} [A(x(t)) \delta(z - x(t))]$$

$$= - A(x(t)) \frac{\partial}{\partial z} \delta(z - x(t))$$

$$\text{L.S.: } \frac{\partial}{\partial t} \delta(z - x(t)) = - \frac{\partial}{\partial z} \delta(z - x(t)) \underbrace{\frac{dx}{dt}}_A \quad \square$$

Kombination von (b) und (c):

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z, t | \dots) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z, t) p(z, t | \dots)] + \frac{1}{2} \sum_{j, k} \frac{\partial^2}{\partial z_j \partial z_k} [B_{jk}(z, t) p(z, t | \dots)]$$

Fokker-Planck-Gl.

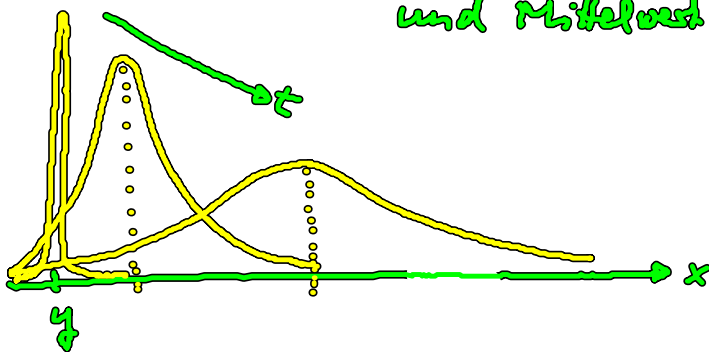
Lösung für kleine Δt + N-dim. Zufallsweg: $B_j(z) \approx B_j(y)$

$$A_i(z) \approx A_i(y)$$

$$p(z, t + \Delta t | y, t) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} (\det B)^{-\frac{1}{2}} \Delta t^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[z - y - A \Delta t]^T B^{-1} [z - y - A \Delta t]}{\Delta t} \right\}$$

Gaußverteilung mit Kovarianzmatrix $\underline{B} \Delta t$

und Mittelwert $\underline{y} + \underbrace{\underline{A} \Delta t}_{\text{Drift}} \leftarrow \text{Diff.}$



2. Klassische Statistik im Nichtgleichgewicht

2.1 Mastergleichung

Für Markov-Prozesse gibt die Chapman-Kolmogorow-Gl.

$$p(x, t'' | x', t') = \int dz p(x, t'' | z, t) p(z, t | x', t') \quad (1)$$

$t'' \geq t \geq t'$

Für Sprung-Prozesse:

$$W(x|z, t) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p(x, t+\Delta t | z, t)}{\Delta t} \quad \text{Übergangswahrscheinl. pro Zeiteinheit}$$

made plausible Annahme für kleine Δt

$$p(x, t+\Delta t | z, t) = \delta(x-z) \left[1 - \underbrace{\int dz_2 W(z_2|z, t) \Delta t}_{\substack{\text{Übergangsw. pro Zeit von } z \\ \text{in irgendeinem Zustand}}} \right] + \underbrace{W(x|z, t) \Delta t}_{\substack{\text{Übergangsw. pro Zeit } z \rightarrow x}}$$

Wahrscheinl., dass kein Übergang stattfindet in Intervall $[t, t+\Delta t]$

Damit lässt sich aus (1) für differentielle Zeitänderungen direkt die Mastergl. ableiten $t'' = t + \Delta t$:

$$p(x, t+\Delta t | x', t') = \int dz \delta(x-z) \left[1 - \int dz_2 W(z_2|z, t) \Delta t \right] p(z, t | x', t') + \int dz W(x|z, t) \Delta t p(z, t | x', t')$$

$$= \left[1 - \Delta t \int dz_2 W(z_2|x, t) \right] p(x, t | x', t') + \Delta t \int dz W(x|z, t) p(z, t | x', t')$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x', t') = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p(x, t+\Delta t | x', t') - p(x, t | x', t')}{\Delta t}$$

$$= \int dz W(x|z, t) p(z, t | x', t') - \int dz W(z|x, t) p(x, t | x', t')$$

$x \leftarrow z \qquad z \leftarrow x$

Mastergleichung

Für diskrete Zustandsvar. $N(t)$ mit Realisierung $n \in \mathbb{N}$
(oder $n \in \mathbb{Z}$)

(z.B. Teilchenzahl bei chem. Reaktionen,
Elektronenzahl beim Tunneln oder bei
Rekombinations-Generations-Prozesse in Halbleitern)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(n, t | n', t') = \sum_m [W(n|m, t) p(m, t | n', t') - W(n|n, t) p(n, t | n', t')]$$

Oder kurz: $p_n(t) := p(n, t | n', t')$ mit Anf. bed. $p_n(t')$

$$W_{nm} := W(n|m, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_n(t) = \sum_m [W_{nm} p_m(t) - W_{mn} p_n(t)]$$

$n \leftarrow m$
gain

$m \leftarrow n$
loss

NB: 1) obdA $m \leftarrow n$ in der Summe, da sich der
Diagonaleintrag weg hebt

2) $W_{nm} \geq 0$

$\sum_n W_{nm} = 1$, da entweder ein Übergang
in anderen Zustand ($\neq n$) oder kein
Übergang

$$\Rightarrow W_{nn} = 1 - \sum_{m \neq n} W_{nm} \quad (\text{Spaltensumme } = 1)$$

Def.
Stochast.
Matrix

3) z.B. Berechnung von $W_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | H_1 | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m)$
aus Fermi's golden Rule
mit Störperturber H_1