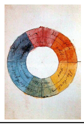

4. Übungsblatt: Diffusion und Nicht-Gleichgewicht

siehe auch http://tu-dresden.de/physik/tqo/lehre

Diskreter Zufallsweg

Auf einem eindimensionalen Gitter mit Gitterabstand Δ hüpft ein Teilchen nach jedem Zeitintervall der Länge ϵ mit Wahrscheinlichkeit p nach rechts und mit $q = 1 - p$ nach links. Wir setzen $x = j\Delta$, $T = N\epsilon$ und bezeichnen mit $u(j, N)$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei $x(j)$ zur Zeit $T(N)$ anzutreffen, wenn es bei Ort und Zeit Null gestartet war. Bestimmen Sie $u(j, N)$ und vereinfachen Sie den Ausdruck mit Sterlings Hilfe. Wie müssen Sie den Grenzfall $\Delta \to 0$, $\epsilon \to 0$ wählen, damit Sie am Ende auf die kontinuierliche Verteilung $p(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left\{-\frac{(x-ct)^2}{4Dt}\right\}$ eines Brownschen Teilchens mit Driftgeschwindigkeit c geführt werden? Wie lautet die zugehörige Bewegungsgleichung?

Ornstein-Uhlenbeck-Prozess

Der Ornstein-Uhlenbeck-Prozess ist durch die Langevingleichung $\dot{x} = -\gamma x + \sqrt{2D}\xi(t)$ mit normiertem weißem Rauschen $\langle\xi(t)\xi(s)\rangle = \delta(t - s)$ definiert. Bestimmen Sie $\langle x(t)\rangle$ und $\langle x(t)x(s)\rangle$ für Zeiten $\gamma t \gg 1$, $\gamma s \gg 1$. Geben Sie die zugehörige Diffusionsgleichung und deren Lösung für die Anfangsbedingung $p(x, 0) = \delta(x - x_0)$ an.

Chapman-Kolmogorov-Gleichung und Pfadintegral

Zeigen Sie für die Übergangswahrscheinlichkeit $p(x, t|x_0, t_0)$ zum Diffusionsprozess $\partial_t p = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}p$ die Gültigkeit der *Chapman-Kolmogorov-Gleichung* $p(x, t|x_0, t_0) = \int dx_1 p(x, t|x_1, t_1)p(x_1, t_1|x_0, t_0)$ mit $t > t_1 > t_0$. Leiten Sie daraus einen Pfadintegral-Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit ab.

Nicht-Gleichgewichtsprozesse: Jarzynski-Gleichung

Ein stark gedämpfter harmonischer Oszillator im Wärmebad wird durch eine externe Kraft $K(t)$ vorübergehend aus dem Gleichgewicht gebracht. Anschließend relaxiert das System in ein neues Gleichgewicht. Es soll also gelten $m\gamma\dot{x} + m\omega^2 x = K(t) + F(t)$ mit weißem Rauschen $\langle F(t)F(s)\rangle = 2m\gamma kT\delta(t - s)$. Die äußere Kraft $K(t)$ soll nur im Intervall $[t_0, t_1]$ (beliebig) zeitabhängig sein und außerhalb die konstanten Werte $K(t \to -\infty) = K_i$, $K(t \to +\infty) = K_f \neq K_i$ annehmen.
Wir definieren die von der äußeren Kraft verrichtete Arbeit durch $W_K = -\int_{t_0}^{t} \dot{K}(s)x(s)ds$. Zeigen Sie die Gültigkeit der *Jarzynski-Gleichung*

$$\langle\exp\{-\beta W_K\}\rangle = \exp\{-\beta\Delta F\},$$

wobei $\Delta F = F_f - F_i$ die Differenz der freien Energien des Oszillators vor und nach der nicht-Gleichgewichts-Phase ist. Diskutieren Sie das Ergebnis.