English Summary:

Autocorrelation fct. $G(\tau) \equiv \langle x(t) x(t+\tau) \rangle$

spectral power density $\boxed{S(\omega) \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{\pi}{T} |\hat{x}(\omega, T)|^2 \overset{!}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, e^{-i\omega\tau} G(\tau)}$

1.3 Chapman–Kolmogórov eq.

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

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

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

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(z,t|y,t') = & \left. -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z,t) p(z,t|y,t')] + \sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z,t) p(z,t|y,t')] \right\} (1) \\ & \left. + \int dx\, [W(z|x,t) p(x,t|y,t') - W(x|z,t) p(z,t|y,t')] \right\} (2) \end{aligned}}$$

differential Chapman–Kolmogorov eq.

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

(2) Master eq. (jump processes, discontinuous in x)

(b) Diffusions-Prozesse (kontinuierlich)

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

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

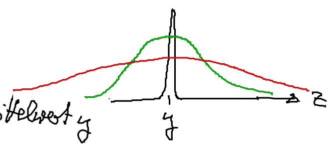
z.B. 1-dim., $\frac{1}{2} B_{ij} = D$ (Diff. konst.) $\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} p}$ (Diffusionsgl.)

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

$(j = -D \nabla n)$

Lösung für Anfangsverteil. $p(z,t|y,t) = \delta(z-y)$ und kleine Δt:

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



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

(c) Drift (kontinuierlich)

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

Liouville-Gl. der klass. Mechanik (konservativ)

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

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

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

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

Beweis (1-dim.):

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

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

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

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

Kombination von (b) und (c):

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}p(z,t|\dots) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}\left[A_i(z,t)\,p(z,t|\dots)\right] + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\left[B_{ij}(z,t)\,p(z,t|\dots)\right]}$$

Fokker-Planck-Gl.:

Lösung für kleine Δt und N-dim. Zufallsvar.: $B_{ij}(z) \approx B_{ij}(y)$

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

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

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

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

2. Klassische Statistik im Nichtgleichgewicht

2.1 Mastergleichung

Für Markov-Prozesse gilt die Chapman-Kolmogorov-Gl.

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

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

Für Sprung-Prozesse:

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

mache plausible Annahme für kleine Δt

$$p(x,t+\Delta t\,|\,z,t) = \delta(x-z)\Big[1-\underbrace{\underbrace{\int dx_2\, W(x_2|z,t)}_{\substack{\text{Übergangsw.}\\ \text{pro Zeit von } z\\ \text{in irgendeinen Zustand}}}\Delta t}_{\substack{\text{Wahrscheinl., dass kein}\\ \text{Übergang stattfindet}\\ \text{im Intervall } [t,\,t+\Delta t]}}\Big] + \underbrace{W(x|z,t)}_{\substack{\text{Übergangsw.}\\ \text{pro Zeit}\\ z\to x}}\Delta t$$

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

$$p(x,t+\Delta t\,|\,x',t') = \int dz\,\delta(x-z)\Big[1-\int dx_2 W(x_2|z,t)\,\Delta t\Big]p(z,t|x',t')$$
$$+\int dz\, W(x|z,t)\,\Delta t\; p(z,t|x',t')$$
$$= \Big[1-\Delta t\int dx_2\, W(x_2|x,t)\Big]p(x,t|x',t') + \Delta t\int dz\, W(x|z,t)\,p(z,t|x',t')$$

$dx_2 \to dz$, $x_2 \to z$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}p(x,t|x',t') &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{p(x,t+\Delta t|x',t') - p(x,t|x',t')}{\Delta t}\\ &= \int dz\, W(x|z,t)\,p(z,t|x',t') - \int dz\, W(z|x,t)\,p(x,t|x',t')\end{aligned}}$$

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

Für diskrete Zufallsvar. $N(t)$ 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)

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

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

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

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}p_n(t) = \sum_{m\neq n}\big[\underbrace{W_{nm}\,p_m(t)}_{\substack{n\leftarrow m\\ \text{gain}}} - \underbrace{W_{mn}\,p_n(t)}_{\substack{m\leftarrow n\\ \text{loss}}}\big]}$$

NB: 1) oBdA $m \neq n$ in der Summe, da sich der Diagonalterm weghebt

2) $W_{nm} \geq 0$

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

$\Rightarrow W_{mm} = 1 - \sum_{n \neq m} W_{nm}$ (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 Störoperator H_1

Beispiel: Zerfallsprozess (radioaktiver Zerfall von $N(t)$ Atomen)

$W_{nn'} = \gamma n' \delta_{n,n'-1}$ γ Zerfallsrate ($n' \to n'-1$) (Wahrscheinl. pro Zeit)

$\dot{p}_n = \sum_{n'} [\gamma n' \delta_{n,n'-1} p_{n'} - \gamma n \delta_{n',n-1} p_n]$

$= \gamma[\underset{n \leftarrow n+1}{(n+1) p_{n+1}} - \underset{n-1 \leftarrow n}{n p_n}]$ Anf. bed. $p_n(0) = \delta_{n,n_0}$