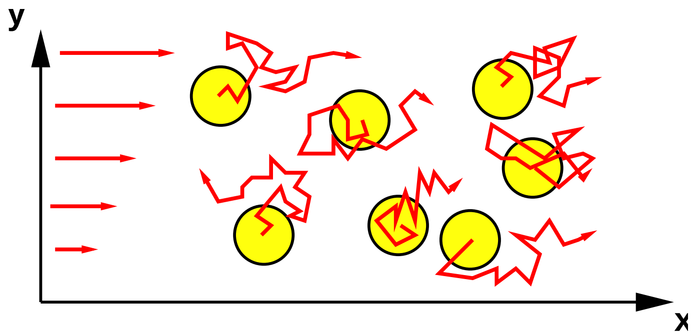
UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zu “Brownsche Bewegung und Statistische Physik”

Übungsblatt 4: Diffusion unter Scherung



Betrachten Sie ein Brownsches Teilchen, das sich in einer gescherten Flüssigkeit befindet. Das heisst, die Flüssigkeit hat ein vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld. Wir nehmen an, die Richtung des Geschwindigkeitsfeldes sei entlang der x-Achse und es gibt einen konstanten Gradienten in y-Richtung (es ist also ein Couette-Fluss). Dann sieht die Smoluchowski-Gleichung folgendermassen aus:

$$\frac{\partial P(x,y,z,t)}{\partial t} = D\nabla^2 P(x,y,z,t) - \dot{\gamma} y \frac{\partial P(x,y,z,t)}{\partial x}. \tag{1}$$

1. Die allgemeine Form der Smoluchowski-Gleichung ist: $\partial_t P(\mathbf{r},t) = \boldsymbol{\partial} \cdot D[\boldsymbol{\partial} - \frac{1}{k_B T}\mathbf{F}]P(\mathbf{r},t)$, wobei $\mathbf{F}$ die auf das Brownsche Teilchen wirkende Kraft ist. Bringen Sie die Gleichung (1) in diese Form. Kann man die Kraft als Gradient eines Potentials darstellen? Benutzen Sie Seperation der Variablen um zu zeigen, dass die Verteilungsfunktion als $P(x,y,z,t) = f(z,t)\phi(x,y,t)$ geschrieben werden kann, wobei $f(z,t)$ die Lösung der ungescherten eindimensionalen Diffusionsgleichung ist. Finden Sie die Gleichung für $\phi(x,y,t)$. Diese kann am einfachsten im Fourier-Raum gelöst werden. Führen Sie die Fourier-Tansformation bezüglich der beiden Raum-Variablen durch und zeigen Sie, dass fuer die transformierte Verteilungsfunktion die folgende Gleichung gilt:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(k_x,k_y,t)}{\partial t} = -k^2 D\tilde{\phi}(k_x,k_y,t) + \dot{\gamma} k_x \frac{\partial \tilde{\phi}(k_x,k_y,t)}{\partial k_y}. \tag{2}$$

   Die Lösung dieser Gleichung wird durch die Kopplung der x- und y-Richtungen erschwert.

2. Lineare partielle Differentialgleichungen erster Ordnung sind oft mittels der Methode der Charakteristiken lösbar. Bei der Lösung der Gleichung (2) konnen wir die Funktion $\tilde{\phi}$ als von zwei Variablen k_y, t abhängig ansehen, während die Variable k_x als Parameter angesehen werden kann. Die Methode der Charakteristiken besteht nun darin, im k_y, t-Raum eine Kurvenschar (die “Charakteristiken” der Gleichung) zu finden, entlang derer sich die partielle Differentialgleichung auf eine gewöhnliche reduzieren lässt. Die Kurven seien durch einen Parameter r parametrisiert: $t = t(r)$, $k_y = k_y(r)$. Zeigen Sie, dass mit der Wahl $t = r$, $k_y = u - \dot{\gamma} k_x r$ (der Parameter u beschreibt die verschiedenen Charakteristiken), die Gleichung $\frac{d\tilde{\phi}}{dr} = -k^2(r) D\tilde{\phi}$ für die vollständige Ableitung $\frac{d\tilde{\phi}}{dr}$ der Funktion entlang der Charakteristik gilt. Lösen Sie diese Gleichung. Ihre Lösung sollte eine beliebige Funkltion $F(u)$ enthalten, die den Anfangsbedingungen für verschiedene u entspricht.

3. Um nun die Lösung der Gl. (2) abzuschliessen, transformieren Sie die Anfangsbedingung $\phi(x, y, t = 0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$ in den Fourier-Raum, um die Anfangsbedngung $\tilde{\phi}(k_x, k_y, t = 0)$ zu bekommen, aus der man die unbekannte Funktion $F(u)$ bestimmen kann. Beachten Sie, dass für $t = 0$, $u = k_y$ gilt. Somit ist die Lösung von (2):

$$\tilde{\phi}(k_x, k_y, t) = \exp\left(-ik_x x_0 - i(k_y + \dot{\gamma} t k_x)y_0 - D\left[k_x^2\left(1 + \frac{1}{3}(\dot{\gamma}t)^2\right)t + k_y^2 t + k_x k_y \dot{\gamma} t^2\right]\right).$$

   Für eindimensionale Diffusion in der x-Richtung ohne Scherung würde man $\tilde{\phi}(k_x, t) = \exp(-ik_x x_0 - Dk_x^2 t)$ bekommen. Die obige Lösung zeigt, dass die Scherung die Diffusionskonstante in $x-$Richtung um den Faktor $(1 + (\dot{\gamma}t)^2/3)$ vergrössert. Dieses Phänomen ist als "Taylor-Dispersion" bekannt und wurde zuerst von G.I.Taylor in den 1940-er Jahren diskutiert. Es macht z. B. das Umrühren von Tee zu einer effektiven Methode, um die zugesetzte Milch zu verteilen.

4. Führen Sie die inverse Fourier-Tranformation durch, um die Verteilungsfunktion $P(x, y, z, t)$ zu der Anfangsbedingung $P(x, y, z, 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ zu bekommen. Das folgende Ergebnis für die Fouriertransformierte einer mehrdimensionalen Gauss-Verteilung $h(x_1, \cdots, x_N)$ mit den Mittelwerten m_i und der Matrix der Standardabweichungen σ_{ij} ist dabei nützlich:

$$\tilde{h} = \exp\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m} - \frac{1}{2}\sum_{ij}\sigma_{ij}k_i k_j\right), \quad h = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}|\sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{ij}(\sigma^{-1})_{ij}(x_i - m_i)(x_j - m_j)\right).$$

5. Das Ergebnis für $P(x, y, z, t)$ ist eine Gauss-Verteilung. Es ist möglich, dieses Ergebnis auch mit Hilfe der Methode der Langevin-Gleichung zu bekommen. Diese lautet in diesem Fall (überdämpfte Bewegung):

$$\zeta\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + \mathbf{f},$$

   mit ζ der Reibungskonstanten, $\mathbf{F}$ der vom Geschwindigkeitsfeld des Lösungsmittels induzierten Kraft und $\mathbf{f}$ der Zufallskraft, über die die üblichen Annahmen gemacht werden können. Lösen Sie die Langevin-Gleichung und berechnen Sie die (nichttrivialen) Momente $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ und $\langle xy\rangle$. Diese legen die entsprechende Gauss-Verteilung eindeutig fest.
   Hinweis: Das Ergebnis für $\mathbf{F}$ aus der Teilaufgabe 1. ist: $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = k_B T/D(\dot{\gamma}y, 0, 0)$