Thermische Ratschen in zwei Dimensionen

Frank Brücher

Diplomarbeit
Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

Dezember 2000

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Ein zentrales Thema der Physik ist die Erforschung der Dynamik komplexer Systeme. Ein naheliegender Ansatz zur Beschreibung eines solchen Systems besteht in der Formulierung deterministischer Bewegungsgleichungen. Dabei wird vorausgesetzt, daß alle das System bestimmenden Größen in ihrer zeitlichen Entwicklung bekannt sind. In vielen Fällen ist diese Voraussetzung jedoch nicht erfüllt. Die Systemdynamik unterliegt vielmehr stochastischen Schwankungen, die letzlich aus Fluktuationen, also nicht–deterministischen Komponenten der treibenden Größen, resultieren.
Möchte man dennoch die deterministische Sichtweise beibehalten, so wäre zu zeigen, daß sich diese stochastischen Effekte durch eine Erweiterung des Systems und eine genauere Beschreibung eliminieren lassen. Diese Eliminierung scheitert jedoch häufig an der hohen Komplexität des erweiterten Problems oder an ganz fundamentalen Sachverhalten, wie der quantenmechanischen Unschärfe.
Das Standardbeispiel eines komplexen Systems ist die thermische Bewegung eines mesoskopischen Teilchens in einer Flüssigkeit, die sogenannte *Brownsche Bewegung*. Man kann prinzipiell versuchen, die Dynamik aller beteiligten Flüssigkeitsmoleküle deterministisch zu erfassen – ein Ansatz der in der Molekulardynamik verfolgt wird. Praktikabler ist hier jedoch die Modellierung des Nettoeinflusses aller Moleküle auf das Teilchen durch eine stochastische Kraft. Dies führt auf die das System gut beschreibende *Diffusionsgleichung*, eine spezielle Fokker–Planck–Gleichung. Alternativ läßt sich die Brownsche Bewegung auch mit einer stochastischen Differentialgleichung, der *Langevin–Gleichung*, beschreiben. Wie in der Theorie der stochastischen Prozesse [1, 2] gezeigt wird, sind beide Vorgehensweisen äquivalent.
Eine interessante Fragestellung ist also, wie sich Systeme generell unter dem Einfluß stochastischer Kräfte verhalten. Bei Überlegungen hierzu setzt man häufig voraus, daß die Zeitskala des betrachteten Systems und die der treibenden stochastischen Kraft deutlich getrennt sind. Auf dieser Annahme basiert auch die Beschreibung der oben erwähnten Brownschen Bewegung. Überhaupt erfüllen die meisten thermischen Systeme die Voraussetzung getrennter Zeitskalen. Die zu ihrer Beschreibung verwendeten stochastischen Bewegungsgleichungen lassen sich in diesem Fall meist analytisch lösen.
Ist die Bedingung der Zeitskalentrennung nicht erfüllt, können zwar weiterhin stochastische Bewegungsgleichungen aufgestellt werden, die jedoch im allgemeinen nicht

mehr analytisch lösbar sind. Da dieser Fall häufiger und interessanter ist, besteht hier ein großer Bedarf an Modellbildung und Lösungsmethoden.
In der vorliegenden Arbeit werden solche komplexen Systeme untersucht, die in der Kopplung eines determinierten Prozesses an einen stochastischen Prozeß bestehen. Speziell werden sogenannte *Ratschensysteme* betrachtet. Nach einer ersten, recht allgemeinen Definition (siehe [3]) lassen sich diese verstehen als Systeme, die „*... in der Lage sind in einer periodischen Struktur Teilchen mit nichtverschwindender makroskopischer Geschwindigkeit zu transportieren, obwohl im [zeitlichen] Mittel keine Kraft wirkt*“.
Ratschensysteme erlangten in einer speziellen Form, der „Ratchet and Pawl“–Anordnung, durch die *Feynman Lectures on Physics* [4] erstmals Mitte der 60er Jahre eine gewisse Popularität. (Dieses spezielle Beispiel einer Ratsche wird ausführlich in Kapitel 2.2 diskutiert.) Anfang der 90er Jahre erlebten Ratschensysteme aufgrund von Beobachtungen zum gerichteten Transport in biologischen Systemen einen regelrechten Boom (siehe z.B. [5]). Der grundlegend neue Ansatz zum Verständnis solcher Systeme bestand darin, den *gerichteten Transport* von Molekülen auf die *Gleichrichtung* von *Nichtgleichgewichtsfluktuationen* an räumlich periodischen, *asymmetrischen Strukturen* (den Ratschen im engeren Sinne) zurückzuführen. In der makroskopischen Welt sind wir mit diesem Effekt vertraut. Er zeigt sich z.B. bei dem automatischen Aufzug von mechanischen Armbanduhren durch „Nichtgleichgewichts“–Handbewegungen. Die Frage, inwiefern sich biologische Phänomene tatsächlich mit Ratschenmechanismen beschreiben lassen wird in der Forschung immer noch diskutiert (siehe z.B. [6]) und kann zur Zeit noch nicht abschließend beantwortet werden. Die Untersuchungen an Ratschensystemen weiteten sich bald von rein biologisch motivierten Modellen auf Systeme mit unterschiedlichsten physikalischen Hintergründen aus. Innerhalb kürzester Zeit entwickelten sich neue physikalische Teilgebiete (In Kapitel 4 wird ein Überblick hierüber gegeben). So erhofft man sich beispielsweise bei der Separation von Teilchen in der Größenordnung von Mikrometern, insbesondere mit Hilfe von zweidimensionalen Ratschenstrukturen, ein großes Anwendungspotential vor allem in der Biotechnologie.

Diese Arbeit ist nun folgendermaßen gegliedert:

Kapitel 2 gibt zunächst eine Einführung in die Theorie der stochastischen Differentialgleichungen am Beispiel der Brownschen Bewegung und stellt dann Feynmans „Ratchet and Pawl“–Anordnung vor. Mit den bis dahin gewonnenen Kenntnissen, wird die obige Definition eines Ratschensystems verständlich. Abschließend werden zwei grundlegende Ratschenmechanismen, die *flashing ratchet* und die *rocking ratchet* eingeführt. Ziel dieses Kapitels ist es insbesondere, den eigenlichen *Ratscheneffekt*, nämlich die Erzeugung gerichteter Bewegung in einem System, in dem im Mittel keine Kraft wirkt, zu erklären.

In **Kapitel 3** werden die theoretischen Konzepte zur Behandlung von Ratschensystemen erarbeitet. Kontinuierliche Ratschenmodelle können durch *stochastische Differentialgleichungen* oder alternativ durch *Fokker–Planck–Gleichungen* beschrieben werden. Wir zeigen an einem konkreten Modell, nämlich dem „minimalen“ *Smolu-*

chowski–Feynman Ratschenmodell, die Äquivalenz dieser beiden Konzepte. In diesem Zusammenhang wird auch die interessanteste Größe bei der Untersuchung von Transporteigenschaften in periodischen Systemen, nämlich der *Teilchenstrom*, eingeführt.
Für die Beschreibung diskreter Ratschenmodelle eignet sich dagegen die *Mastergleichung*. Ein konkretes Beispiel für diese Vorgehensweise wird in Kapitel 4.2.3 behandelt.

Kapitel 4 liefert einen Überblick über die wesentlichen Modelle der „Ratschen–Physik", von denen einige Verallgemeinerungen der bisher besprochenen Modelle darstellen, andere sich dagegen grundlegend von diesen unterscheiden. Insbesondere gehen wir ausführlich auf die wenigen bisherigen Arbeiten zu zweidimensionalen Ratschensystemen ein.
In Abschnitt 4.2.3 wird ein diskretes eindimensionales Hüpfmodell zur Beschreibung einer eindimensionalen *flashing-ratchet* auf zwei Dimensionen erweitert. Da sich der Teilchenstrom im zweidimensionalen Modell, anders als im eindimensionalen, nicht mehr analytisch berechnen läßt, wird er in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern numerisch untersucht. Es zeigt sich aber, daß die Untersuchung dieses diskreten Modells aufgrund der hohen Anzahl von physikalisch unanschaulichen Parametern äußerst ineffektiv ist. Dies führt dazu, daß wir uns im folgenden stattdessen mit kontinuierlichen Modellen befassen, die zwar numerisch wesentlich schwieriger zu implementieren sind, wegen ihrer geringen Anzahl an Parametern (die zudem physikalisch anschaulich sind) dafür aber eine sehr einfache Auswertung zulassen.
Abschnitt 4.3 stellt in knapper Form dar, wie der bekannte Gleichrichtungseffekt in dc SQUIDs mit ungleichen Josephson–Kontakten im Rahmen eines zweidimensionalen kontinuierlichen Ratschenmodells zu interpretieren ist[1].

In **Kapitel 5** werden zwei unterschiedliche numerische Zugänge zur Behandlung von kontinuierlichen zweidimensionalen Ratschensystemen vorgestellt. Ein möglicher Weg besteht in einer zeitlichen Diskretisierung der zur Beschreibung des Systems verwendeten stochastischen Bewegungsgleichungen. Eine Alternative hierzu stellt eine kürzlich entwickelte Methode dar, die auf Finite–Elemente Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen basiert und deshalb auch auf Fokker–Planck–Gleichungen anwendbar ist.

In **Kapitel 6** beschäftigen wir uns eingehender mit *kontinuierlichen* zweidimensionalen Ratschensystemen. Ein wesentliches Ziel der Untersuchungen ist es festzustellen, ob diese zweidimensionalen Systeme durch eine grundlegend andere Dynamik bestimmt sind als ihre eindimensionalen „Verwandten", oder ob sie sich prinzipiell auf eindimensionale Modelle zurückführen lassen[2].
Wir entwickeln hierzu ein Modell, daß tatsächlich in vieler Hinsicht eine größere

[1] Wir stützen uns hierbei auf die im II. Physikalischen Institut der Universität zu Köln durchgeführten Untersuchungen. Siehe hierzu [7, 8, 9].

[2] Diese Fragestellung ist u.a. deshalb nicht trivial, weil viele Experten auf dem Gebiet der Ratschenphysik [10] sich von einer Erweiterung auf zwei Dimensionen keine neuen Erkenntnisse versprechen.

Komplexität aufweist, als das ihm entsprechende eindimensionale Modell.
Die Motivation zur Entwicklung dieses speziellen Modelles ergab sich außerdem aus dem Studium neuartiger Methoden zur Teilchenseparation mittels zweidimensionaler Ratschenstrukturen in der Biotechnologie. (Das Modell selbst ist jedoch auch unabhängig von diesem Kontext interpretierbar.) Hieraus ergibt sich eine zweite wesentliche Fragestellung: Kann man für ein gegebenes Separationsproblem die Parameter des Modells so bestimmen, daß der Trennungsmechanismus maximal effizient wird?

Schließlich geben wir in **Kapitel 7** eine Zusammenfassung der Arbeit und gehen auf mögliche Erweiterungen und Modifikationen des untersuchten kontinuierlichen Modells ein.

Kapitel 2

Physikalische Problemstellung

Ist es möglich, die Zufallsbewegung Brownscher Teilchen „gleichzurichten“ und so die Energie eines Wärmebades in nutzbare Arbeit umzuwandeln? Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik verbietet diese Energieumwandlung. Hierbei wird jedoch implizit vorausgesetzt, daß das System abgeschlossen ist und sich im thermischen Gleichgewicht befindet. Richard Feynman hat mit einem Gedankenexperiment veranschaulicht, warum die Antwort auf obige Frage bei solchen Systemen negativ ausfallen muß.

In diesem Kapitel wird aufgezeigt, daß es tatsächlich möglich ist, mit sogenannten „Ratschen“ thermische Zufallsbewegung in gerichteten Transport umzuwandeln. Dazu wird im ersten Teil dieses Kapitels die Brownsche Bewegung behandelt. An diesem Beispiel soll auch die Methode der stochastischen Bewegungsgleichungen eingeführt werden, die im weiteren Verlauf der Arbeit eine zentrale Rolle spielen wird.

Im zweiten Teil dieses Kapitels wird dann Feynmans Gedankenexperiment vorgestellt. Es wird sich herausstellen, daß dieses Experiment den zweiten Hauptsatz bestätigt, womit in Bezug auf unsere Frage nichts gewonnen scheint. Es zeigt sich allerdings, daß durch eine „naheliegende Korrektur“ an Feynmans Experiment ein theoretisches Modell konstruiert werden kann, das gerichteten Transport möglich macht.

Im dritten Teil dieses Kapitels sollen einfache Ratschensysteme vorgestellt werden. Insbesondere soll auf die beiden grundlegenden Mechanismen, nämlich die *flashing ratchet* [1] und die *rocking ratchet* [2] eingegangen werden.

2.1 Brownsche Bewegung

Die Moleküle eines Gases oder einer Flüssigkeit unterliegen permanent unregelmäßigen Positionsänderungen im gesamten Medium. Diese Positionsänderungen lassen sich mit Hilfe von mikroskopischen Partikeln oder Makromolekülen, die in das Medium eingebracht werden, verlangsamen (siehe Abb. 2.1). Da diese Teilchen sehr oft (etwa 10^{14} mal pro Sekunde) mit den Molekülen des Mediums stoßen, verändern sie im Laufe der Zeit ihre Position. Weiterhin sind die Teilchen des Mediums un-

[1] Eine mögliche deutsche Übersetzung wäre etwa blinkende oder pulsierende Ratsche.

[2] Diese könnte man übersetzt als schaukelnde Ratsche bezeichnen.

tereinander einer Reihe von kurzen, wenig korrelierten Stößen ausgesetzt, so daß es weder sinnvoll noch möglich ist, die Dynamik der einzelnen Teilchen im Detail zu untersuchen.
Einzelne Makromoleküle können unter dem Mikroskop beobachtet werden. So entdeckte Brown 1827, daß sich Pollen in Wasser in sogenannte Körner auflösen und diese dann eine unregelmäßige Zick-Zack-Bewegung ausführen[3].

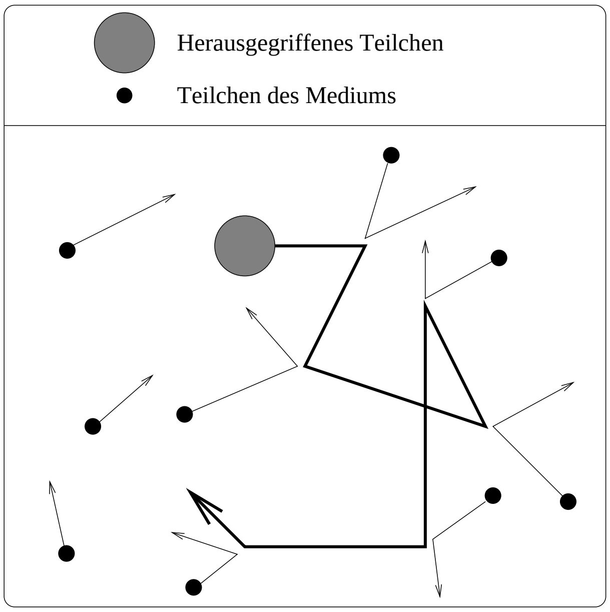

Abbildung 2.1: Veranschaulichung der Zufallsbewegung eines Brownschen Teilchens

Langevin–Beschreibung der Brownschen Bewegung

Zur Entwicklung eines physikalischen Modells betrachten wir ein beliebiges Teilchen in dem Medium und beschränken uns auf eine Dimension. Es soll das Verhalten der Geschwindigkeit v untersucht werden. Auf das herausgegriffene Teilchen wirken sich die Stöße mit den anderen Teilchen auf zwei unterschiedliche Weisen aus, nämlich

- als eine mittlere Reibungskraft und
- als eine stochastische Kraft.

Es ist leicht einzusehen, daß die Stöße nicht allein durch eine Reibungskraft beschrieben werden können. Dies wäre eine rein deterministische Beschreibungsweise und entspräche einem Teilchen in einem viskosen Medium. Das Teilchen würde in diesem Fall seine Bewegungsenergie abhängig von der Viskositätskonstanten mehr oder weniger schnell verlieren und schließlich zur Ruhe kommen. Nach dem Gleichverteilungssatz (in einer Dimension) hat das Teilchen in Abhängigkeit von der Temperatur T des Mediums aber die mittlere Energie

[3]Brown glaubte deshalb, ein kleinstes „Lebensmolekül“ gefunden zu haben, aus dem sich alles höhere Leben zusammensetzt.

$$\frac{1}{2}m\langle v^2\rangle = \frac{1}{2}k_B\,T. \tag{2.1}$$

Jeder Sprung eines Moleküls von einer Position zur anderen - unter der Stoßeinwirkung von Nachbarmolekülen - kann als zufälliger Prozeß bezeichnet werden. Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Ereignisses hängt nur von der des vorausgegangenen Ereignisses und der Wahrscheinlichkeitsfunktion, die den Übergang von einem zum anderen Zustand beschreibt, ab. Einen solchen stochastischen Prozeß bezeichnet man als Markov-Prozeß.[4] Die stochastische Bewegungsgleichung für die Brownsche Bewegung lautet

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma\,v + R(t). \tag{2.2}$$

Dabei ist γ der normierte Reibungskoeffizient und $R(t)$ eine stochastische Kraft (auch als Rauschkraft oder einfach als Rauschen bezeichnet). Gleichung (2.2) stellt den Prototypen einer stochastischen Differentialgleichung dar und wird als Langevingleichung bezeichnet.

Typischerweise wird ein zunächst deterministischer Prozeß durch Hinzufügen einer Rauschkraft, die die Ankopplung der Umgebung an diesen Prozeß beschreibt, zu einem Zufallsprozeß. Wir fassen jetzt den Einfluß der Teilchen auf das herausgegriffene Teilchen als Rauschen auf. Das Problem ist durch Gleichung (2.2) noch nicht vollständig definiert. Wir müssen noch einige Aussagen über den Rauschterm treffen. Zunächst soll für den Mittelwert

$$\langle R(t)\rangle = 0 \tag{2.3}$$

gelten. Damit verschwindet die mittlere Arbeit, die von der Rauschkraft $R(t)$ geleistet wird. Um weitere Aussagen machen zu können, benötigen wir Informationen über die zeitliche Korrelationsfunktion $\langle R(t)\,R(t')\rangle$ der Rauschkräfte. Sehr häufig macht man nun die Annahme, daß die Dynamik der Rauschkräfte auf einer sehr viel schnelleren Zeitskala abläuft als die Dynamik des Systems ohne Rauschkräfte. Die Zeitskala der v–Dynamik ohne Rauschkräfte ist in unserem Fall durch $1/\gamma$ gegeben. Relativ dazu soll sich die Korrelationsfunktion $\langle R(t)\,R(t')\rangle$ wie eine δ–Funktion verhalten: [5]

$$\langle R(t)\,R(t')\rangle = \Gamma\,\delta(t-t'). \tag{2.4}$$

[4]Einen Markov-Prozeß bezeichnet man auch als einen Prozeß mit minimalem Gedächtnis, da dessen zeitliche Entwicklung nur vom vorausgegangenen Ereignis abhängt. Zeitlich unkorrelierte Prozesse haben in diesem Sinne kein Gedächtnis.

[5]Für Zeitdifferenzen $t-t'$ größer als die Stoßzeit τ_0 gilt zunächst $\langle R(t)R(t')\rangle = 0$. Diese Annahme scheint sinnvoll, da Kollisionen verschiedener Moleküle mit dem herausgegriffenen näherungsweise unabhängig sind. Hier kann der Grenzübergang $\tau_0 \to 0$ gemacht werden und man erhält (2.4).

Die δ-Funktion taucht hier zwingend auf, da die mittlere Energie des Teilchens nach (2.1) endlich sein muß. Γ wird als Rauschstärke bezeichnet. Relativ zur Zeitskala der v–Dynamik soll $R(t)$ als *weißes Rauschen* beschreibbar sein. Jedes Rauschen, dessen Korrelationsfunktion (2.4) erfüllt, bezeichnet man als weißes Rauschen. Es sei aber darauf hingewiesen, daß diese Zeitskalentrennung nicht notwendig in jedem Fall besteht. Man spricht dann von *farbigem Rauschen.*
Mit obigen Annahmen über den Mittelwert und die Korrelationsfunktion des Rauschens läßt sich die stochastische Differentialgleichung (2.2) exakt lösen. Da $v(t)$ nun auch zu einem Zufallsprozeß wird können wir natürlich nur Aussagen über dessen Wahrscheinlichkeitsverteilung machen. Das Lösungsverfahren von Gleichung (2.2) ist z.B. in [1, 2] zu finden. Da es sich dabei um ein Standardproblem handelt, sollen hier nur die wichtigsten Ergebnisse diskutiert werden.
Mittelwert und Korrelationsfunktion des v-Prozesses ergeben sich zu

$$\frac{d\langle v\rangle}{dt} = -\gamma\,\langle v\rangle, \qquad \langle v(t)\rangle = \langle v(0)\rangle\, \mathrm{e}^{-\gamma\, t} \tag{2.5}$$

bzw.

$$\langle v(t_1)\, v(t_2)\rangle = v^2(0)\,\mathrm{e}^{-\gamma\,(t_1+t_2)} + \frac{\Gamma}{2\,\gamma}\,\left[\mathrm{e}^{-\gamma\,(t_1-t_2)} - \mathrm{e}^{-\gamma\,(t_1+t_2)}\right]. \tag{2.6}$$

Für das folgende ist nur die *stationäre* Korrelationsfunktion interessant. Dazu machen wir den Grenzübergang $t_1 \to \infty$ und $t_2 \to \infty$, wobei jedoch $t_1 - t_2$ =const ≥ 0 sei. Dann folgt aus (2.6)

$$\langle v(t_1)\, v(t_2)\rangle = \frac{\Gamma}{2\,\gamma}\,\mathrm{e}^{-\gamma\,(t_1-t_2)}, \qquad t_1 \geq t_2. \tag{2.7}$$

Insbesondere folgt daraus für das Schwankungsquadrat der Geschwindigkeit

$$\langle v^2\rangle = \frac{\Gamma}{2\,\gamma}. \tag{2.8}$$

Einsetzen des Gleichverteilungssatzes (2.1) in (2.8) führt zu der Gleichung

$$\Gamma = \frac{2\,k_B\,T}{m}\,\gamma. \tag{2.9}$$

Dieses ist die einfachste Form einer *Fluktuations–Dissipations–Beziehung*, die eine Konsistenzbedingung zwischen der Reibungskraft $-\gamma\, v$ und der Rauschkraft $R(t)$ darstellt. Die FD–Relation besagt, daß Reibungskraft und Rauschkraft nur gemeinsam auftreten können. Aus diesem Grund hat man bei der Formulierung einer stochastischen Bewegungsgleichung zur Beschreibung fluktuierender Variablen aufgrund interner Rauschkräfte keine beliebige Freiheit.

Ist man auch an der Dynamik der Ortskoordinate x des Prozesses interessiert, muß man die stochastische Differentialgleichung

$$\frac{dx}{dt} = v \tag{2.10}$$

lösen. Deren stationäre Lösung zeigt, daß sich das Teilchen im Mittel nicht bewegt, d.h.

$$\langle x \rangle = 0, \tag{2.11}$$

aber eine Diffusionsbewegung

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt \tag{2.12}$$

mit der Diffusionskonstanten $D = \langle v^2 \rangle / \gamma$ ausführt. Die letzte Gleichung ist als Einstein-Relation bekannt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $p(x,t)$ des Teilchens „verschmiert“ also mit der Zeit[6] (siehe Abb. 2.2).

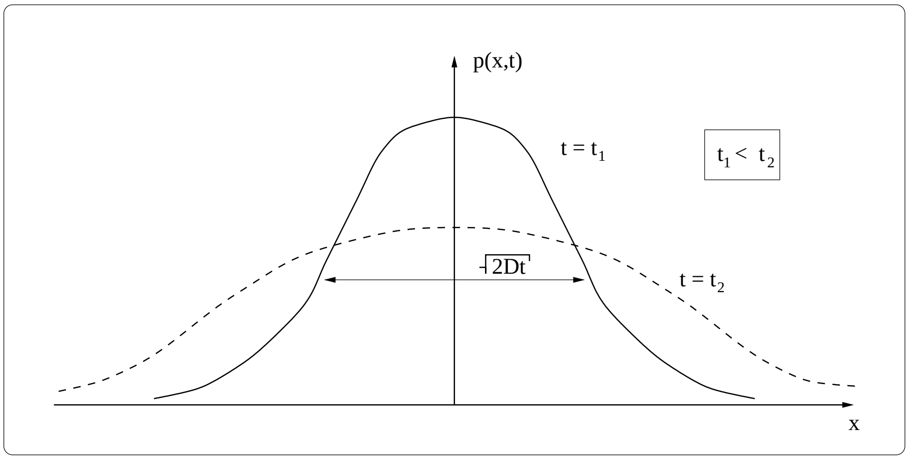

Abbildung 2.2: Reine Diffusionsbewegung eines Brownschen Teilchens

Dementsprechend ist die Brownsche Bewegung ein Beispiel für eine *reine* Diffusionsbewegung. Wie läßt sich diese nun in eine gerichtete Bewegung umwandeln? Eine einfache Möglichkeit wäre das gesamte System, in dem die Brownsche Bewegung stattfindet, einem äußeren Kraftfeld auszusetzen, welches etwa einen Temperatur- oder Dichtegradienten in dem System bewirkt. Damit ist die *stochastische Spiegelungssymmetrie* des Systems gebrochen[7] und somit ist Transport möglich. Dies ist noch nicht sonderlich überraschend. Interessanter wird das Problem, wenn wir die Fragestellung folgendermaßen abwandeln: Kann man ohne ein makroskopisches Kraftfeld eine Diffusionsbewegung in eine gerichtete Bewegung umwandeln?

[6] Der Zusammenhang zwischen der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $p(x,t)$ und dem Schwankungsquadrat $\langle x^2 \rangle$ wird in Kapitel 3 klar.

[7] $R(t)$ und $-R(t)$ sind nicht mehr gleichwahrscheinlich [11] (P. Curie, 1894).

2.2 Feynmans „ratchet and pawl“

In der Planckschen Formulierung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik wird festgestellt, daß es eine Maschine, die in einem abgeschlossenem System permanent Wärmeenergie in mechanische Energie wandelt (ein Perpetuum mobile 2. Art), nicht geben kann. Einige Physiker versuchten diesen Satz mit Hilfe von Gedankenexperimenten zu veranschaulichen, indem sie ein scheinbar funktionstüchtiges Perpetuum mobile 2. Art konstruierten.
Smoluchowski diskutierte bereits 1912 einen mechanischen Gleichrichter (im Wärmebad), bestehend aus einem Zahnrad und einer Sperrklinke mit Zwangsführung, der Drehungen in nur einer Richtung zulassen sollte [12] . Um von den thermischen Stößen der umgebenden Moleküle profitieren zu können, muß der Gleichrichter oder einige seiner Teile von mesoskopischer Abmessung sein. Wie Smoluchowski zeigte, ist er damit aber auch der Brownschen Bewegung unterworfen und wird unwirksam.
Als Erweiterung dieses Gedankenexperimentes schlug Richard Feynman in seinen „Lectures on Physics“(1962) [4] den folgenden Mechanismus vor.
Gegeben seien zwei Glasbehälter gleicher Temperatur ($T_1 = T_2$), verbunden mit einer Achse auf deren einem Ende ein Flügelrad befestigt ist (siehe Abb. 2.3). Am anderen Ende befinde sich ein Zahnrad mit Sperrklinke (pawl). Die Zähne seien angeschrägt, so daß nur Drehungen in eine Richtung möglich sind (ratchet). Das Flügelrad wird sich infolge der thermischen Stöße der Gasmoleküle zufällig vor und zurück bewegen, wobei Drehungen in der Vorzugsrichtung der Ratsche zugelassen, entgegengesetzte jedoch verhindert werden. An der Achse sei ein Faden mit Gewicht befestigt. Der Faden wickelt sich auf und das Gewicht wird angehoben. Die Vorrichtung kann scheinbar mechanische Arbeit verrichten.

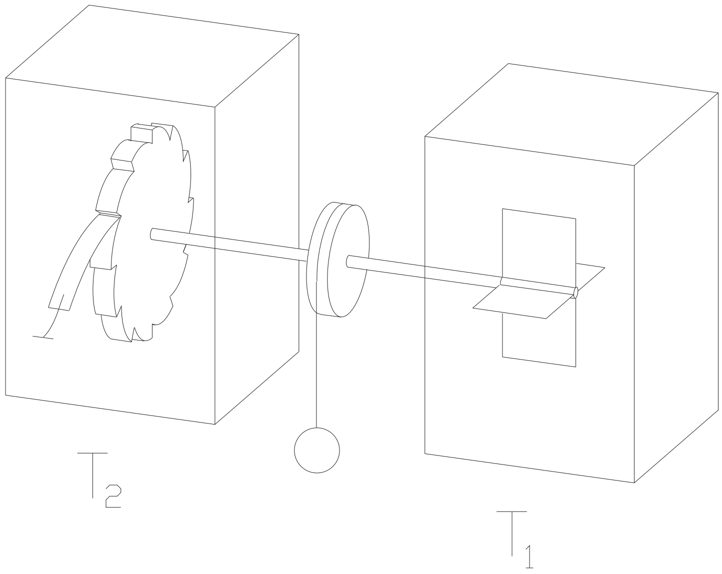

Abbildung 2.3: Ratsche und Sperrhaken

Was hierbei vernachlässigt wird, ist die thermisch angeregte Eigenbewegung der

Sperrklinge. Sei diese z.B. durch eine kleine Feder gehalten, so wird zum Anheben der Klinke und der Drehung des Rades eine Energie ϵ benötigt, welche sie aus den Fluktuationen des Flügelrades (Drehung in Vorzugsrichtung der Ratsche), aber auch aus den thermischen Stößen auf die Sperrklinke (entgegengesetzte Drehung) erhalten kann. Da der Weg entgegen der Vorzugsrichtung kürzer ist als der in Vorzugsrichtung sind die Energien für beide Prozesse also genau gleich. Da in beiden Behältern die gleiche Temperatur herrscht, ist auch die Wahrscheinlichkeit gleich, diese Energie aus den thermischen Stößen zu erhalten, so daß das Gewicht zwar eine schwankende Bewegung ausführt, aber im statistischen Mittel an Ort und Stelle bleibt. Wie bei der Brownschen Bewegung läßt sich mit dieser Vorrichtung keine mechanische Arbeit gewinnen.
Feynman berechnete auch den Fall unterschiedlicher Temperaturen in den Behältern und kommt zu dem erstaunlichen Ergebnis, daß sich bei Kühlung der Ratsche (d.h. $T_2 < T_1$) die Achse in die beabsichtigte Richtung dreht, bei Erhöhung der Temperatur ($T_2 > T_1$) aber eine umgekehrte Winkelgeschwindigkeit zu erwarten ist. Die Vorrichtung arbeitet dann unter Ausnutzung der Temperaturdifferenz wie z.B. eine Carnot-Maschine und steht somit nicht im Widerspruch zum zweiten Hauptsatz, der nur für das thermodynamische Gleichgewicht gilt.[8]
Ein Teil der Fluktuationen, die auf die Ratsche wirken (die Bewegung des Flügelrades), ist in diesem Fall extern, wohingegen man sich bei gleichen Temperaturen das System in einem einzigen großen Kasten denken kann, in dem alle Fluktuationen inneren Ursprungs sind. *Externes Rauschen kann demnach ordnend wirken und mechanische Arbeit verrichten.*
In der folgenden Auflistung werden die wichtigsten Fakten dieses Abschnitts noch einmal hervorgehoben. Diese lassen sich durch die Einführung eines Potentials zu einem stochastischen Modell, das in Kapitel 3.2 vorgestellt wird, „verarbeiten".

- Die Ratsche (das Flügelrad) ist ein räumlich periodisches System. Es kann durch ein räumlich periodisches Potential $V(x) = V(x + L)$ beschrieben werden.

- Die Symmetrie der Ratsche ist wegen des Mechanismus der Sperrklinke (Zähne sind asymmetrisch) gebrochen. Die Reflexionssymmetrie des Potentials ist also ebenfalls gebrochen: es existiert keine reelle Zahl x_0, für die die Gleichung $V(x_0 - x) = V(x_0 + x)$ erfüllt ist.

- Die im Mittel auf die Flügel wirkende Kraft, die durch die Stöße der Gasmoleküle verursacht wird, ist Null. Dies wird durch thermische Fluktuationen beschrieben.

- Gerichtete Bewegung wird durch einen Temperaturgradienten möglich. Das ist trivial. Wir nehmen im folgenden statt dessen an, daß eine treibende Nichtgleichgewichtskraft mit Mittelwert Null auf das System einwirkt [9].

[8] In [13] wird kritisiert, daß eine Maschine die gleichzeitig in Kontakt mit zwei Wärmebädern unterschiedlicher Temperatur steht, nicht reversibel arbeiten kann. Folglich kann sie auch nicht die Effizienz eines Carnot-Prozesses erreichen.

[9] Im Mittel wirkt also keine Kraft auf das System und intuitiv erwartet man daher auch keine gerichtete Bewegung. Dies stellt sich im folgenden jedoch als falsch heraus.

Im letzten Punkt der Auflistung machen wir die entscheidende Annahme, daß das System durch externe korrelierte Fluktuationen getrieben wird. Damit haben wir die beiden wesentlichen Ingredienzien, nämlich eine räumliche Asymmetrie des Potentials und zeitlich korrelierte Fluktuationen der Umgebung, gefunden. Wir kommen nun direkt zum Mechanismus einer Ratsche[10].

2.3 Zwei grundlegende Ratschenmechanismen

Wir suchen einen Mechanismus, aus dem ein Teilchenstrom resultiert, obwohl im Zeitmittel keine Nettokraft oder ein makroskopischer Gradient vorliegt. Die folgenden Voraussetzungen sind hinreichend für gerichteten Transport ohne Nettokraft und typische Eigenschaften vieler Ratschensysteme. Erstens braucht man eine eingebaute räumliche Asymmetrie des Potentials, das oft periodisch angenommen wird, um Transport über längere Strecken zu erlauben. Zweitens benötigt man thermische Zufallsbewegung der Teilchen und drittens zeitlich korrelierte Fluktuationen des Potentials. Mechanismen, die diese drei Voraussetzungen erfüllen, nennt man *flashing ratchets*. Anderseits kann das Ratschenpotential selbst zeitlich konstant sein, wenn die Teilchen zusätzlich zum thermischen Rauschen noch zeitlich korreliertem (farbigem) Rauschen ausgesetzt sind. Diese Mechanismen faßt man unter dem Begriff *rocking ratchet* zusammen.

2.3.1 Flashing Ratchets

Von Feynmans Idee inspiriert, untersuchten Ajdari und Prost [14, 15] 1993 die Bewegung Brownscher Teilchen in einem allgemeinerem physikalischen System mit räumlicher Asymmetrie. In einer Lösung unterliegen diese Teilchen der Reibung und den zufälligen Stößen der Flüssigkeitsmoleküle. Zusätzlich soll ein sogenanntes Ratschenpotential auf sie wirken.

Das Verhalten der Teilchen ist nun dem des Sperrhakens in Feynmans Versuch vergleichbar. Auf den ersten Blick würde man denken, daß die Teilchen durch thermische Stöße aus dem Potentialminimum häufiger die Flanke geringeren Anstiegs des Potentials erklimmen können. Im statistischen Mittel würde daraus ein makroskopischer Teilchenstrom resultieren, das System könnte mechanische Arbeit verrichten. Solange das System sich jedoch im Gleichgewicht befindet, ist (wie bei Feynman) für die Überwindung einer Energiebarriere deren Höhe ausschlaggebend. Die Kramers-Raten, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Minimum in ein benachbartes, sind in beiden Richtungen gleich groß. Also ist im thermodynamischen Gleichgewicht kein makroskopischer Strom möglich.

Adjari und Prost konnten theoretisch und experimentell zeigen, daß eine zeitlich korrelierte Änderung des Potentials einen Teilchenstrom erzeugen kann. Als Poten-

[10] Es gibt noch keine einheitliche Definition für ein Ratschensystem. Mit Ratschen sollen im folgenden immer solche Systeme bezeichnet werden, die in einem periodischen Potential eine gerichtete Bewegung erzeugen können. Feynmans „ratchet and pawl“ ist in diesem Sinne also keine Ratsche.

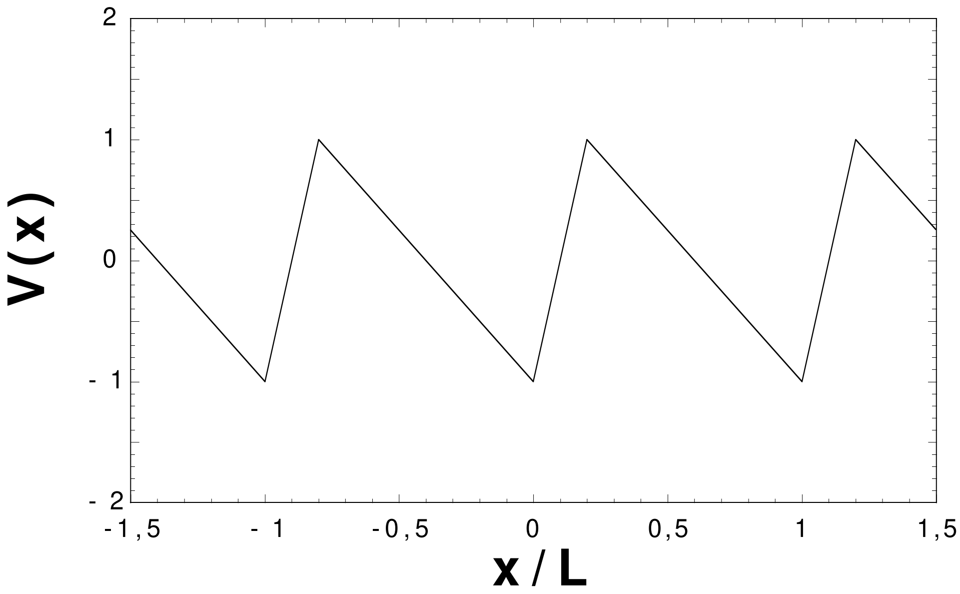

Abbildung 2.4: Schematische Darstellung eines Sägezahnpotentials

tial wurde ein Sägezahnpotential (siehe Abb. 2.4) gewählt.
Das Potential wird periodisch an- und ausgeschaltet. Freie Diffusion und Bindung der Teilchen wechseln, das Teilchen wird gegen die Vorzugsrichtung[11] des Ratchets getrieben (siehe Abb. 2.5). Im Experiment wurden Teilchen von 0.1 und $5\mu m$ in wässriger Lösung einem elektrostatischen Potential der Form eines asymmetrischen Sägezahns ausgesetzt. Dieses Potential wurde periodisch geschaltet und der vorausgesagte Strom konnte tatsächlich beobachtet werden. Er hängt empfindlich von der Schaltzeit und der Diffusionskonstanten der Teilchen ab. Letzteres legt die Idee einer möglichen Teilchenseparation nahe[12].

2.3.2 Rocking Ratchets

Eine anderen Zugang zum Transportproblem in asymmetrischen Potentialen fand, ebenfalls im Jahr 1993, M.O. Magnasco [17] . Er konnte zeigen, daß für ein zeitlich konstantes Potential eine zusätzliche periodische oder stochastische Kraft mit verschwindendem Mittelwert ebenfalls einen Teilchentransport im Ratchet erzeugt. Notwendig sind auch hier zeitliche Korrelationen, die von außen in das System gebracht werden müssen. Das ist bei einer periodischen Funktion trivialerweise der Fall; für eine stochastische Kraft bedeutet es eine echt frequenzabhängige Spektraldichte oder eine nichtgaußsche Verteilung der Fluktuationen (z.B. eine Poisson-Verteilung in [18]).
Wichtig ist hervorzuheben, daß die Fluktuationen externen Ursprungs sind. Für ein sogenanntes internes farbiges Rauschen (thermisches Rauschen unter Berücksichti-

[11] Die Vorzugsrichtung bezeichnet die Richtung des flacheren Anstiegs.
[12] Eine völlig andere experimentelle Realisierung einer *flashing-ratchets* gelang Faucheux (siehe [16]).

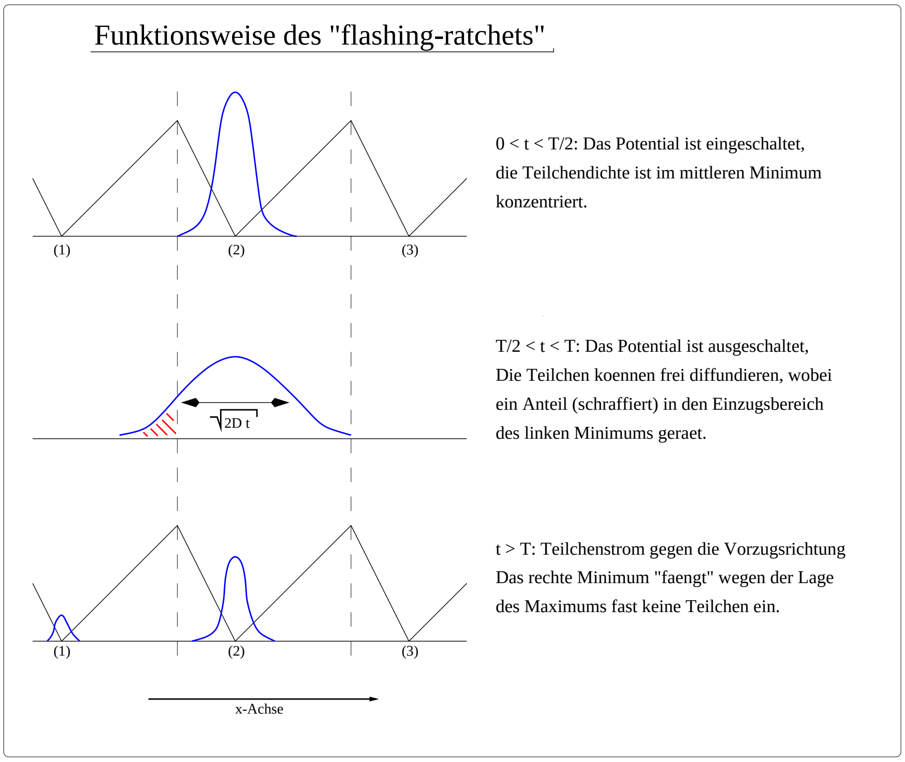

Abbildung 2.5: Funktionsweise eines *flashing-ratchets*

gung einer endlichen Korrelationszeit) ergibt sich ein verallgemeinertes Fluktuations-Dissipations-Theorem, das zu einer Reibungskraft mit Gedächtnis (memory-damping) und natürlich auf die Geschwindigkeitsverteilung der Brownschen Teilchen in Ort und Geschwindigkeit führt.
Eine Dynamik unter Einfluß zeitlich korrelierter Fluktuationen ohne „memory-damping“beschreibt demnach die Wirkung externer Fluktuationen, also eine Nichtgleichgewichtssituation.
Magnasco untersuchte den Fall der überdämpften Bewegung, bei der die Trägheit des Teilchens gegenüber der Reibung vernachlässigt wird. Dies ist in vielen Fällen gerechtfertigt (siehe Anhang B). Anschaulich ist das Auftreten des Stromes im Fall der periodischen Kraft (siehe [19]). Das Potential wird um einen bestimmten Winkel (abhängig von der Amplitude der periodischen Funktion) nach oben und (nach Ablauf der halben Schwingungsdauer) nach unten gekippt (siehe Abb. 2.6).
Der Winkel wird so gewählt, daß ein Teilchen aus einem Minimum über die schwächer ansteigende Flanke des Potentials in das nächste Minimum gelangen kann, nicht aber über die steilere Flanke.
Man versteht so auch die Wirkung von zeitlich korreliertem Rauschen in dem Fall, daß die treibende Kraft stochastischer Natur ist (correlation ratchet). Das Potential ist eine endliche Zeit nach oben bzw. nach unten gekippt. Die Stärke des Rauschens bestimmt einen mittleren maximalen Kippwinkel, der wiederum so gewählt werden kann, daß obiger Mechanismus auch hier wirkt. Es liegt auf der Hand, daß bei zu großem Kippwinkel der Effekt verschwinden muß. Die Teilchen richten sich dann aus-

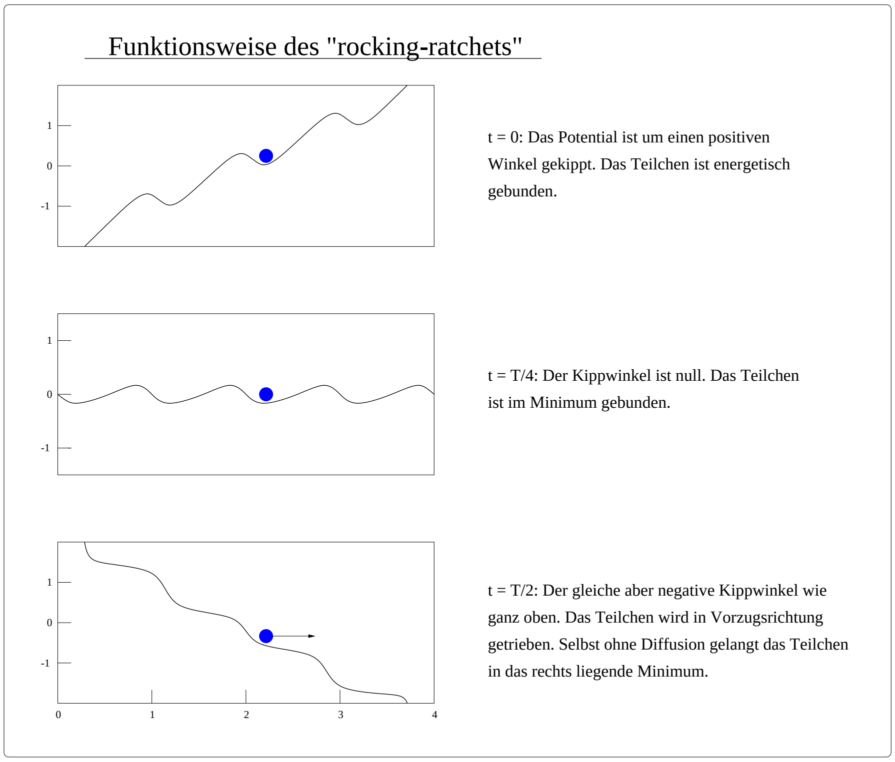

Abbildung 2.6: Funktionsweise eines *rocking-ratchets*

schließlich nach der periodischen oder stochastischen Kraft, die keine Raumrichtung auszeichnet. Bei zu kleinen Kippwinkeln wird die Bewegung hingegen von Diffusion (weißem Rauschen) dominiert. Auch in diesem Fall wird der Strom kleiner (adiabatischer Grenzfall). Magnasco konnte dies in analytischen Rechnungen an stückweise linearen Potentialen und in Simulationen für kompliziertere Potentiale zeigen. Im weiteren konnte er zeigen, daß schwaches weißes Rauschen die Effizienz des Transportes erhöhen kann, weil sich dann die Anzahl der Sprünge vergrößert. In [20, 21] wurde dann gezeigt, daß weißes Rauschen bei periodisch gekippten Ratschen sogar zu einer Stromumkehr führt.

Wir haben in diesem Kapitel die beiden grundlegenden Ratschenmechanismen qualitativ kennengelernt. Im folgenden Abschnitt 3.1 sollen die mathematischen Grundlagen zur Beschreibung allgemeiner Ratschensysteme erarbeitet werden. Im Anschluß daran stellen wir im Abschnitt 3.2 ein vereinfachtes stochastisches Modell von Feynmans „ratchet and pawl“ vor. Die Erkenntnisse aus diesem Modell lassen sich direkt auf allgemeine Ratschensysteme übertragen.

Kapitel 3

Grundlagen I: Begriffsbildung

Im Abschnitt 3.1 werden drei mathematische Konzepte vorgestellt, mit deren Hilfe Ratschensysteme quantitativ untersucht werden können. Den stochastischen Differentialgleichungen und der Fokker-Planck-Gleichung wird dabei im weiteren Verlauf der Arbeit eine zentrale Bedeutung zukommen. Wir zeigen im Abschnitt 3.2 anhand eines konkreten Beispiels, dem „minimalen" Smoluchowski–Feynman Ratschenmodell, den Zusammenhang zwischen den beiden Konzepten auf. Dort werden wir auch allgemeine Aussagen über die wichtigste Größe in Ratschensystemen, den Teilchenstrom, machen. Insbesondere zeigen wir analytisch, daß der Strom im thermodynamischen Gleichgewicht verschwindet.
Eine spezielle Klasse von stochastischen Prozessen, nämlich die Markov-Prozesse und deren Bilanzgleichung, die Mastergleichung, werden ebenfalls in diesem Abschnitt vorgestellt. Diese werden in Kapitel 4.2.3 benötigt, in dem wir ein diskretes Modell für eine *flashing ratchet* untersuchen.

3.1 Bewegung unter stochastischen Kräften

Die zentrale Frage dieses Abschnittes ist: Wie entwickelt sich ein eigentlich deterministisches System unter dem Einfluß von stochastischen Kräften? Ein Beispiel für ein solches System ist die gedämpfte eindimensionale Bewegung in einem Potential $V(x)$ im Kontakt mit einem Wärmebad. Folgende Methoden zur Behandlung dieses Problems werden hier besprochen:

- Die Theorie der stochastischen Differentialgleichungen (Kapitel 3.1.1),
- Die Theorie der Fokker-Planck-Gleichung (Kapitel 3.1.2),
- Markov-Prozesse und die Mastergleichung (Kapitel 3.1.3).

Dabei bieten sich die ersten beiden Methoden besonders zur Behandlung kontinuierlicher stochastischer Prozesse an, wohingegen die letzte zur Behandlung diskreter Prozesse eingesetzt werden. Der Vollständigkeit halber wird unter dem lezten Punkt kurz auf kombinierte stochastische Prozesse eingegangen.Diese werden insbesondere von der Gruppe um Schnakenberg an der RWTH Aachen zur numerischen Untersuchung von Ratschensystemen eingesetzt [28, 30, 31].

3.1.1 Stochastische Differentialgleichungen

Stochastische Differentialgleichungen (SDGL) beschreiben die Dynamik von Größen, die Fluktuationen unterworfen sind. Die in den Gleichungen enthaltenen stochastischen Terme werden auch als Rauschen bezeichnet. Je nach Ursache der Fluktuationen wird zwischen intrinsischem und externem Rauschen unterschieden.
Intrinsisches oder internes Rauschen ensteht in einem abgeschlossenen System durch Fluktuationen aus den Wechselwirkungen. Eine Entkopplung von System und Fluktuationen ist nicht möglich. Die relativen Fluktuationen verlieren ihre Bedeutung bei Erhöhung der Teilchenzahl N, da sie sich wie $1/\sqrt{N}$ verhalten. Sie verschwinden also im thermodynamischen Limes.
Externes Rauschen beschreibt die Ankopplung des Systems an seine Umgebung. Dabei wird vorausgesetzt, daß das System sehr viel kleiner als die Umgebung ist. Die Umgebung spielt die Rolle eines Reservoirs und erfährt keine Änderung durch die Dynamik des Systems. Rückkopplungen sind also vernachlässigbar, und die stochastischen Eigenschaften des externen Rauschens sind unabhängig vom System.
Im folgenden werden Systeme unter dem Einfluß externen Rauschens betrachtet. Die zeitliche Dynamik solcher Systeme läßt sich in allgemeiner Form durch eine SDGL beschreiben

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t; Y(t)). \tag{3.1}$$

Hierbei sind die $\mathbf{x}(t)$ die verallgemeinerten Systemkoordinaten und $\mathbf{F}$ Kräfte, die vom Systemzustand $\mathbf{x}$, der Zeit t und einem oder mehreren stochastischen Prozessen $Y(t)$ abhängen. Die stochastischen Eigenschaften der $Y(t)$ werden als bekannt vorausgesetzt.
Für eine gegebene Anfangsbedingung $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ ist durch die SDGL (3.1) für jede Realisierung $y(t)$ von $Y(t)$ eindeutig eine Realisierung $\mathbf{x}(t; [y], \mathbf{x}_0)$ bestimmt. $\mathbf{x}(t; [y], \mathbf{x}_0)$ ist ein Funktional von $y(t)$. Somit hängt $\mathbf{x}(t)$ von allen Werten $y(t')$ mit $t_0 \leq t' \leq t$ ab. Die Gesamtheit (das Ensemble) aller möglichen Realisierungen $\mathbf{x(t)}$ definiert den stochastischen Prozeß $\mathbf{X}(t)$. Ziel ist es, stochastische Größen wie Wahrscheinlichkeitsdichten des Prozesses $\mathbf{X}(t)$ zu bestimmen.
Der Archetyp eines solchen Problems ist die gedämpfte eindimensionale Bewegung in einem Potential $V(x)$ im Kontakt mit einem Wärmebad:

$$\ddot{x}(t) = -\gamma\, \dot{x}(t) - \frac{d}{dx} V(x) + \xi(t)\,. \tag{3.2}$$

In vektorieller Schreibweise mit einfachen Ableitungen entsprechend der allgemeinen Form (3.1) lautet sie

$$\begin{aligned} \dot{x} &= v \\ \dot{v} &= -\gamma\, v(t) + F(x) + \xi(t)\,, \end{aligned} \tag{3.3}$$

mit der aus dem Potential resultierenden Kraft $F(x) = -dV(x)/dx$. Der thermische Kontakt wird hierbei durch gaußsches weißes Rauschen $\xi(t)$ beschrieben. Dieses ist mittelwertfrei und zeitlich unkorreliert, d.h.

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\, \xi(t') \rangle = 2\, D\, \delta(t-t'), \tag{3.4}$$

wobei D als Rauschstärke bezeichnet wird. Sie ist weiterhin über das bekannte Fluktuations-Dissipationstheorem (FDT) $D = \gamma\, k_B T$ mit der Dämpfung γ und der Temperatur T verknüpft.
Diese SDGL beschreibt zum Beispiel die Dynamik eines Moleküls auf mikroskopischer Ebene. Einzelne Atome des Moleküls schwingen in einem effektiven Potential gegeneinander und tauschen durch Stöße mit anderen Molekülen Energie aus. Dies wird durch das weiße Rauschen $\xi(t)$ modelliert.
Betrachtet man die freie Bewegung mit $V(x) = \text{const.}$, so entkoppeln Ort und Geschwindigkeit und man erhält für letztere die bereits aus Kap.2.1 bekannte Langevin-Gleichung

$$\dot{v}(t) = -\gamma\, v + \xi(t)\,, \tag{3.5}$$

welche die Geschwindigkeit eines Brownschen Teilchens beschreibt.

3.1.2 Die Fokker-Planck-Gleichung

Die wahrscheinlichkeitstheoretische Beschreibung über die Dynamik der Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x, v, t)$ führt auf die bekannte Kramers-Gleichung (eine spezielle Fokker–Planck Gleichung)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(x,v,t) &= \mathcal{L}_K(x,v)\, p(x,v,t) \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial x}\, v - \frac{\partial}{\partial v}\, (-\gamma v + F(x)) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) p(x,v,t), \end{aligned} \tag{3.6}$$

wobei $\mathcal{L}_K(x, v)$ als Kramers-Operator bezeichnet wird. Das Kramers-Problem ist somit ein Spezialfall der Theorie der Fokker-Planck-Gleichungen und $\mathcal{L}_K(x, v)$ ein Fokker-Planck-Operator. Eine detaillierte Herleitung des Überganges von der SDGL (3.2) zur Fokker-Planck-Gleichung (FPG) findet man beispielsweise in [1, 2] und einen Überblick bzw. aktuelle Untersuchungen speziell zur Kramers-Gleichung in [22, 23].
Die Kramers-Gleichung (3.6) zeigt die wesentlichen Größen und Operatoren, die im folgenden immer wieder auftreten werden. Zunächst spiegelt sich der deterministische Anteil der Bewegung im Drift- oder Flußoperator wider

$$\mathbb{F}_F = -\frac{\partial}{\partial x}\, v \; - \frac{\partial}{\partial v}\, (-\gamma v + F(x))\,,$$

dessen Struktur mit den entsprechenden Anteilen der SDGL (3.3) korrespondiert. Er alleine würde zu einem reinen Drift der Wahrscheinlichkeitsdichte führen. Hat die deterministische Bewegung stationäre Punkte, z.B. Minima des Potentials, so

wäre die Wahrscheinlichkeitsdichte im Grenzfall großer Zeiten t in diesen Punkten lokalisiert.
Der stochastische Anteil durch das weiße Rauschen manifestiert sich allein im Diffusionsoperator

$$\mathbb{F}_D = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,.$$

Er bewirkt ein Auseinanderlaufen der Wahrscheinlichkeitsdichte und führt bei Existenz stationärer Punkte dazu, daß die Bewegung für große Zeiten nur mit einer gewissen Varianz um diese Punkte lokalisiert ist.
Im Grenzfall großer Dämpfung γ (siehe Anhang B) kann der Beschleunigungsterm in (3.2) gegen den Dämpfungsterm vernachlässigt werden und man erhält mit $\tilde{F}(x) = F(x)/\gamma$ und $\tilde{\xi}(x) = \xi(x)/\gamma$ die überdämpfte SDGL

$$\dot{x}(t) = \tilde{F}(x(t)) + \tilde{\xi}(t). \tag{3.7}$$

Man erkennt hierin wieder eine verallgemeinerte Form der Langevin-Gleichung (3.5). Die zu (3.7) äquivalente Fokker-Planck-Gleichung heißt nun Smoluchowski-Gleichung und lautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}p(x,t) &= \mathcal{L}_S(x)\,p(x,t) \qquad (3.8)\\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\left(\tilde{F}(x) - \tilde{D}\frac{\partial}{\partial x}\right)p(x,t), \end{aligned}$$

mit $\tilde{D} = D/\gamma^2$. Wieder besteht der Fokker-Planck-Operator $\mathcal{L}_S$ aus Drift- und Diffusionsterm. Dieses Problem ist einer analytischen Behandlung noch gut zugänglich. Ist die Systembewegung durch die Form des Potentials räumlich beschränkt, so kann die stationäre Lösung leicht hergeleitet werden und lautet in den ursprünglichen Größen

$$p^s(x) = C\,\mathrm{e}^{-\gamma V(x)/D}\,, \tag{3.9}$$

wobei C die Normierungskonstante ist. Die allgemeine Herleitung der stationären Lösung wird in Kapitel 3.2.4 skizziert. Durch Vergleich mit der Verteilung im thermischen Gleichgewicht zur Temperatur T erhält man für die Rauschstärke wieder das FD–Theorem $D = \gamma k_B T$.
Bisher waren alle auftretenden Prozesse kontinuierlich. Diese Eigenschaft soll nun für den treibenden stochastischen Prozeß aufgegeben werden. Es ist dann keine Beschreibung des Systems durch eine Fokker–Planck–Gleichung mehr möglich. Sie erfolgt durch andere, in ihrer Struktur jedoch ähnliche, Gleichungen.

3.1.3 Markov-Prozesse und Mastergleichung

Eine spezielle Wahl für die externe stochastische Kraft $\xi(t)$ sind diskrete Markovprozesse. Bei einem solchen stochastischen Prozeß nimmt die Rauschkraft diskrete Werte ξ_n an. Übergänge von einem Zustand n' in den Zustand n mit den zugehörigen Kräften $\xi_{n'}$ und ξ_n erfolgen mit einer Rate $W_{n,n'}$.
Als Motivation zur Einführung der Markov–Prozesse stellen wir zunächst die unkorrelierten Prozesse vor. Unser Ausgangspunkt ist die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte $p(1|2,3,\dots)$ für einen stochastischen Prozeß $x(t)$. Wir verwenden hier die symbolische Schreibweise "1" für das Ereignis (x_1, t_1), ausführlich zu schreiben als $x_1 \leq x(t_1) < x_1 + dx_1$, usw. für "2","3" .... $p(1|2,3,\dots)$ soll die physikalische Situation beschreiben, in der das Ereignis "1" durch *frühere* Ereignisse "2","3", ... bedingt ist. $t_1 \geq t_k$ für $k = 2, 3, \dots$, stellt sicher, daß wir eine physikalisch sinnvolle Situation mit einem kausalen Zusammenhang beschreiben. Darüber hinaus wollen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit auch $t_2 \geq t_3 \geq \dots$ annehmen, insgesamt also $t_1 \geq t_2 \geq t_3 \geq \dots$.
Verlangen wir für alle bedingten Dichten

$$p(1|2,3,\dots) = p(1) \qquad \text{für} \qquad t_1 > t_2 \geq t_3 \geq \dots, \tag{3.10}$$

so bedeute dies, daß ein Ereignis "1" von allen Ereignissen der Vergangenheit statistisch unabhängig ist. Wir erhalten durch wiederholte Verwendung von (3.10) für die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} p(1,2,3,\dots) &= p(1|2,3,\dots)\, p(2,3,\dots) \\ &= p(1)\, p(2|3,\dots)\, p(3,\dots) \\ &= p(1)\, p(2)\, p(3|\dots) \\ &= \dots \\ &= p(1)\, p(2)\, p(3) \ \dots . \end{aligned} \tag{3.11}$$

Eine andere Ausdrucksweise für dieses Verhalten lautet: der Prozeß $x(t)$ "vergißt" seine Vergangenheit instantan, er wird deshalb auch *unkorreliert* genannt.

Als Markov–Prozeß definieren wir nun einen Prozeß $x(t)$ mit der Eigenschaft

$$p(1|2,3,\dots) = p(1|2) \qquad \text{für} \qquad t_1 > t_2 > t_3 > \dots \tag{3.12}$$

Die Markov–Eigenschaft in (3.12) geht also einen Schritt über den unkorrelierten Prozeß hinaus: die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses "1" soll nur durch das zeitlich letzte Ereignis "2" einer Folge von vergangenen Ereignissen "2","3", ... bedingt sein. Frühere Ereignisse als "2" haben keinen bedingenden Einfluß mehr auf die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses "1". Die Markov–Annahme stellt eine minimale Version der "Erinnerung" eines Prozesses an seine Vergangenheit dar. Die Vergangenheit vor dem zeitlich letzten bekannten Ereignis wird „vergessen“.
Die Markov–Annahme ist eine Idealisierung für eine Reihe von physikalisch realen Prozessen, deren Berechtigung im Einzelfall jeweils nachzuprüfen wäre. Als Beispiel

betrachten wir wieder die *Brownsche Bewegung.* Wenn Orte und Impulse des beobachtbaren Teilchens und sämtlicher Teilchen des Umgebungssystems zu einem Zeitpunkt t_0 bekannt sind, ist die Bewegung des Gesamtsystems für alle $t \geq t_0$ eindeutig bestimmt, also auch die des beobachtbaren Brownschen Teilchens. Wenn dagegen bei t_0 nur die Position $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ des Brownschen Teilchens bekannt ist, kann die Annahme, daß die räumliche Wahrscheinlichkeitsdichte des Brownschen Teilchens zu einer späteren Zeit $t > t_0$ allein dadurch und noch nicht einmal durch seine Orte zu früheren Zeiten bedingt sei, nicht exakt erfüllt sein, sondern höchstens näherungsweise, sobald das physikalische „Gedächtnis", gespeichert in der Bewegung des Umgebungssystems, zeitlich hinreichend kurz ist.
Wir fügen noch eine weitere Betrachtungsweise hinzu: es könnte sein, daß die räumliche Wahrscheinlichkeitsverteilung des Brownschen Teilchens zur Zeit $t > t_0$ nicht nur vom Ort $\mathbf{r}_0$ zur Zeit t_0, sondern auch von seiner Geschwindigkeit $\mathbf{v}_0$ zur Zeit t_0 abhängt. Um die Geschwindigkeit durch Orte auszudrücken, sind aber wenigstens *zwei* Ortsangaben zu verschiedenen Zeiten erforderlich. Folglich kann in diesem Fall die Markov–Annahme allein in der Ortsvariablen des Brownschen Teilchens nicht richtig sein.
Wir nehmen jetzt an, daß die Markov–Annahme (3.12) für den Prozeß $x(t)$ erfüllt sei und untersuchen das Verhalten der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte $p(1, 2, 3, \ldots)$ in Analogie zu Gleichung (3.11). Durch wiederholte Anwendung der Markov–Annahme finden wir

$$\begin{aligned} p(1,2,3,\ldots,n) &= p(1|2,3,\ldots,n)\,p(2,3,\ldots,n) \\ &= p(1|2)\,p(2|3,\ldots,n)\,p(3,\ldots,n) \\ &= p(1|2)\,p(2|3)\,p(3|4,\ldots,n)\,p(4,\ldots,n) \\ &= \ldots \\ &= p(1|2)\,p(2|3)\,p(3|4)\ldots p(n-1|n)\,p(n). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Außerdem gilt allgemein, d.h. nicht nur für Markov–Prozesse,

$$p(x,t) = \int dx'\,p(x,t;x',t') = \int dx'\,p(x,t|x',t')\,p(x',t'). \tag{3.14}$$

(3.13) und (3.14) zusammen bedeuten, daß ein Markov–Prozeß vollständig bestimmt ist, wenn

1. $p(x,t|x',t')$ für *alle* $t > t'$ und
2. $p(x,t)$ für *ein* $t = t_0$

bekannt sind.
Stationäre Markov–Prozesse sind ausschließlich durch die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(x,t|x',t') := p(x,t-t'|x')$$

bestimmt, denn für einen stationären Prozeß ist

$$\lim_{t\to\infty} p(x,t|x') = p(x), \tag{3.15}$$

gleich der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte.

Markov-Prozesse werden durch die Mastergleichung charakterisiert. Die Master–Gleichung spielt eine zentrale Rolle für die Formulierung von Markov–Prozessen in der statistischen Physik. Sie lautet in der räumlich diskreten Version

$$\frac{\partial}{\partial t}\, p(n,t|n') = \sum_{n''} \left[W_{nn''}\, p(n'',t|n') - W_{n''n}\, p(n,t|n')\right]. \tag{3.16}$$

$W_{nn''}$ ist die Übergangsrate für den Übergang von n'' nach n. Die Mastergleichung hat die Struktur einer Bilanzgleichung. Der erste Term der rechten Seite beschreibt die Übergänge von allen Zuständen n'' in den Zustand n. Er ist der positiv zu zählende Zuwachs im Zustand n. Der zweite Term beschreibt entsprechend Übergänge von n in alle anderen Zustände n'', also den negativ zu zählenden Verlust im Zustand n. Die Bedeutung der Master–Gleichung liegt darin, daß sie verwendet wird, um aus vorgegebenen Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeit die bedingten Wahrscheinlichkeiten $p(n,t|n')$ zu berechnen, und zwar durch Lösen der Master–Gleichungen (3.16) als Differentialgleichungen bzw. als ein System von Differentialgleichungen. Die Vorgabe der $W_{nn''}$ muß aus anderen physikalischen Theorien erfolgen, z.B. aus der Quantentheorie, in der durch zeitabhängige Störungsrechnung Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeit bestimmt werden. In den meisten Fällen jedoch erfolgt die Vorgabe der der $W_{nn''}$ jedoch durch ad–hoc–Annahmen aufgrund physikalischer Plausibilitätsargumente.
Abschließend soll hier das *Prinzip des detaillierten Gleichgewichts* behandelt werden. Man kann zeigen, daß die Mastergleichung (3.16) immer wenigstens eine stationäre Lösung besitzt. Stationäre Lösungen p_n^{stat} sind Lösungen des linearen Gleichungssystems

$$\sum_{n''} \left[W_{nn''}\, p_{n'}^{stat} - W_{n''n}\, p_n^{stat}\right] = 0. \tag{3.17}$$

Ein spezieller stationärer Zustand ist das thermodynamische Gleichgewicht. Eine der mehreren möglichen Definitionen des thermodynamischen Gleichgewichts gründet sich auf das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts: Ein System, das durch die Mastergleichung (3.16) beschrieben ist, befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn seine stationären Wahrscheinlichkeiten p_n^{stat} die Gleichungen

$$W_{nn'}\, p_{n'}^{stat} - W_{n'n}\, p_n^{stat} = 0 \quad \text{für } \textit{alle} \text{ Paare} \quad n \neq n' \tag{3.18}$$

erfüllen. Das thermodynamische Gleichgewicht ist also der stationäre Zustand, in dem alle Zustände paarweise miteinander im Gleichgewicht stehen.

Kombinierte Prozesse

Betrachten wir die Bewegung eines Teilchens in einem deterministischen Potential $V(x)$ mit der zugehörigen Kraft $F(x) = -V'(x)$ unter dem Einfluß einer stochastischen Kraft $\xi(t)$. Die Kraft $\xi(t)$ sei ein Markov-Prozeß mit den diskreten Kräften ξ_n und Übergangsraten $W_{n,n'}$. In dem Zeitintervall, in dem die Kraft den Wert ξ_n annimmt, wird die Bewegung durch die Differentialgleichung

$$\dot{x} = F(x) + \xi_n \tag{3.19}$$

beschrieben. Die Sprünge zwischen den Rauschkräften erfolgen instantan.
Eine äquivalente Beschreibung dieses aus der deterministischen Bewegung gemäß (3.19) und den Sprüngen zwischen den Rauschkräften gemäß (3.16) zusammengesetzten Prozesses (Composite-Markov-Prozeß [1]) liefert die Mastergleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p_n(x,t) &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[(F(x) + \xi_n)\, p_n(x,t) \right] \\ &\quad + \sum_{n'} \left[W_{nn'}\, p_{n'}(x,t) - W_{n'n}\, p_n(x,t) \right] \end{aligned} \tag{3.20}$$

für die Wahrscheinlichkeit $p_n(x,t)dx$, das Teilchen zur Zeit t im Zustand n des Rauschens im Intervall $[x, x+dx]$ zu finden.

3.2 Das minimale Smoluchowski–Feynman Ratschenmodell

Wir zeigen hier anhand eines konkreten Modells die Äquivalenz der zur Beschreibung des Modells aufgestellten Fokker–Planck Gleichung mit der stochastischen Diffferentialgleichung und definieren den Teilchenstrom. Abschließend zeigen wir analytisch, daß unabhängig von der Potentialform, im thermodynamischen Gleichgewicht kein Strom auftritt.

3.2.1 Das Modell

Eine komplette mathematische Beschreibung von Feynmans „ratchet and pawl“ ist zwar möglich aber sehr kompliziert, insbesondere auf mikroskopischem Niveau. Deshalb behandeln wir hier ein vereinfachtes Modell. Wir betrachten ein Brownsches Teilchen in einer Dimension mit der Koordinate $x(t)$ und Masse m. Dessen Dynamik soll durch folgende Gleichung[1] beschrieben werden:

$$m\ddot{x}(t) + V'(x(t)) = -\gamma\, \dot{x}(t) + \xi(t)\ . \tag{3.21}$$

[1] Punkte und Striche bezeichnen zeitliche bzw. räumliche Differentiationen.

Hier ist $V(x)$ ein periodisches Potential mit der Periode L und gebrochener räumlicher Symmetrie. Ein typisches Beispiel für ein solches Potential (siehe Abb. 3.1) ist

$$V(x) = V_0 \left[\sin(2\pi x/L) + 0.25\, \sin(4\pi x/L)\right] . \tag{3.22}$$

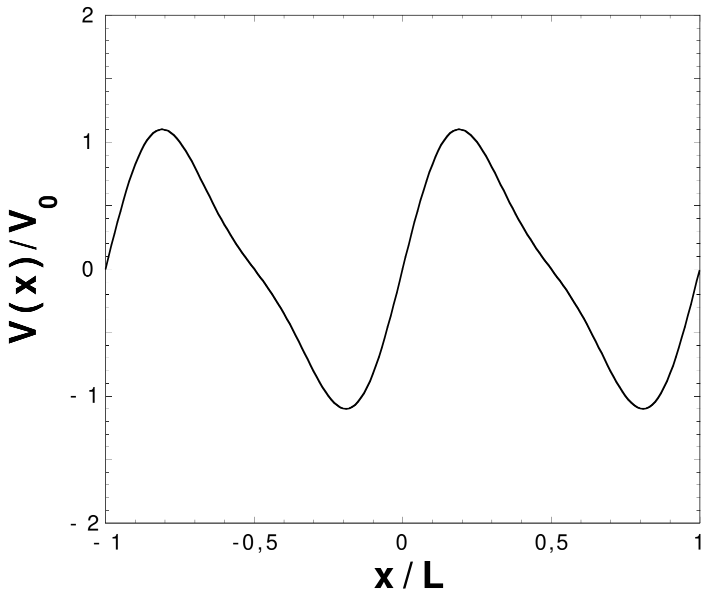

Abbildung 3.1: Typisches Ratschenpotential mit Periode L und gebrochener Reflexionssymmetrie

Die linke Seite von (3.21) beschreibt den deterministischen Teil der Teilchendynamik, während die rechte Seite die Effekte der thermischen Umgebung des Teilchens beschreibt. Zu diesen Effekten gehört erstens die Energiedissipation, in (3.21) durch den Reibungsterm mit Reibungskoeffizienten γ modelliert, und zweitens eine zufällig fluktuierende Kraft in Form eines thermischen Rauschens $\xi(t)$. Diese beiden Effekte sind über das Fluktuations–Dissipations Theorem miteinander verbunden.
Im folgenden beschränken wir uns auf den typischen Fall, daß Trägheitseffekte vernachlässigt werden können (siehe Anhang B). Wir können dann formal in (3.21) $m = 0$ setzen. In diesem sogenannten *überdämpften Grenzfall* erhalten wir das „minimale“ *Smoluchowski-Feynman ratchet* Modell

$$\gamma\, \dot{x}(t) = -V'(x(t)) + \xi(t), \tag{3.23}$$

wobei $\xi(t)$ gaußsches weißes Rauschen der Intensität $2\gamma k_B T$ ist. Im folgenden Kapitel wollen wir die Fokker–Planck Gleichung für dieses Modell herleiten.

3.2.2 Die Fokker-Planck-Gleichung

Wie wir wissen, ist gaußsches weißes Rauschen unkorreliert in der Zeit. Diese Tatsache und das unendlich große zweite Moment $\langle \xi^2(t) \rangle$ sind mathematische Idealisierungen. In der Physik ist die Korrelationszeit endlich, aber klein verglichen mit allen relevanten Zeitskalen des Systems. In diesem Sinne führen wir einen kleinen Zeitschritt $\triangle t$ ein und betrachten eine in der Zeit diskretisierte Version der stochastischen DGL (3.23)

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) - \Delta t\,[V'(x(t_n)) + \xi_n]/\gamma\ , \tag{3.24}$$

wobei $t_n := n\,\Delta t$ und die ξ_n unabhängige gaußsche Zufallszahlen mit dem zweiten Moment

$$\langle \xi_n^2 \rangle = 2\,\gamma\, k_B T/\Delta t\ . \tag{3.25}$$

sind. Die kontinuierliche Dynamik (3.23) mit unkorreliertem Rauschen kann dann als mathematischer Grenzwert von (3.24) für $\Delta t \to 0$ aufgefasst werden [1, 2, 32] . Weiterhin ist die diskrete Form (3.24) ein brauchbarer Startpunkt für numerische Simulationen des Problems (siehe Kapitel 5.1). Im Anhang D ist eine Ableitung der Fokker–Planck Gleichung, basierend auf (3.24), gegeben.
Hier wollen wir eine Ableitung der Fokker–Planck Gleichung vorstellen, die sich durch physikalische Plausibilitätsargumente nachvollziehen läßt. Die Trajektorien $x(t)$ des in (3.23) beschriebenen stochastischen Prozesses bilden eine statistische Gesamtheit. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x,t)$, ein Brownsches Teilchen am Ort x zum Zeitpunkt t zu finden, folgt aus der Gesamtheit durch Mittelung über die einzelnen Trajektorien (Scharmittel) in der Form

$$P(x,t) := \langle \delta(x - x(t)) \rangle\ . \tag{3.26}$$

Daraus folgt unmittelbar für die Normierung von $P(x,t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x,t) = 1\ . \tag{3.27}$$

Eine andere triviale Konsequenz ist, daß $P(x,t) \geq 0$ für alle x und t.
Zur Bestimmung der Dynamik von $P(x,t)$ betrachten wir zunächst die Gleichung (3.23) für den Spezialfall $V'(x) \equiv 0$. Damit erhalten wir aber gerade die bekannte Langevin–Gleichung zur Beschreibung der Brownschen Bewegung. Dieser Fall beschreibt die freie Diffusion mit der Diffusionskonstanten $D = k_B T/\gamma$. Daraus folgt, daß die Dynamik von $P(x,t)$ durch die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \frac{k_B T}{\gamma}\, \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \tag{3.28}$$

bestimmt wird.
Betrachten wir nun den deterministischen Anteil der Dynamik, d.h $\xi(t) \equiv 0$ in

Gleichung (3.23). In Analogie zur klassischen Hamiltonmechanik finden wir, daß sich die Wahrscheinlichkeitsdichte entsprechend einer Liouville-Gleichung der Form

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{V'(x)}{\gamma}\,P(x,t)\right\} \tag{3.29}$$

entwickelt. Weil sowohl Gleichung (3.28) als auch Gleichung (3.29) linear in $P(x,t)$ sind, folgt aus der Kombination der beiden Beiträge die *Fokker-Planck Gleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{V'(x)}{\gamma}\,P(x,t)\right\} + \frac{k_B T}{\gamma}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t)\ . \tag{3.30}$$

Nun haben wir die wichtigsten Werkzeuge in der Hand, um die wohl interessanteste Größe im Zusammenhang mit dem Transport in periodischen Systemen, nämlich den Teilchenstrom, zu untersuchen.

3.2.3 Der Teilchenstrom

Der *Teilchenstrom* $\langle \dot{x} \rangle$ ist definiert als das zeitabhängige Scharmittel über die Geschwindigkeiten der einzelnen Trajektorien der Gesamtheit

$$\langle \dot{x} \rangle := \langle \dot{x}(t) \rangle\ . \tag{3.31}$$

Da die Wahrscheinlichkeitsdichte die gesamte Information über das System enthält, stellt sich die Frage, wie man den Teilchenstrom aus dieser extrahiert. Die Beziehung zwischen $\langle \dot{x} \rangle$ und $P(x,t)$ folgt durch Mittelung in (3.23) und Ausnutzung von $\langle \xi \rangle = 0$. Daraus erhält man zunächst $\langle \dot{x} \rangle = -\langle V'(x(t)) \rangle / \gamma$. Weil das Scharmittel per Definition ein Mittel in Bezug auf die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x,t)$ ist, ergibt sich

$$\langle \dot{x} \rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\frac{V'(x)}{\gamma}\,P(x,t)\ . \tag{3.32}$$

Obige Herleitung von (3.32) hat den Nachteil, daß die spezielle Form (3.23) der stochastischen Dynamik benutzt wurde. Für den späteren Gebrauch wollen wir hier kurz auf eine generellere Methode eingehen. Ausgehend von der Definition (3.26) erhält man, unabhängig von Details der Dynamik die $x(t)$ bestimmt, eine Mastergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\,P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}\,J(x,t) = 0, \tag{3.33}$$

$$J(x,t) := \langle \dot{x}(t)\,\delta(x - x(t)) \rangle\ . \tag{3.34}$$

Es sei bemerkt, daß die Symbole x und $x(t)$ hier zwei komplett verschiedene mathematische Objekte bezeichnen. Die Mastergleichung (3.33) hat die Form einer

Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte. Deshalb bezeichnet man $J(x,t)$ als *Wahrscheinlichkeitsstrom.* Durch Integration der Gleichung (3.34) und mit Definition (3.31) erhält man folgende generelle Beziehung zwischen dem Wahrscheinlichkeitsstrom und dem Teilchenstrom:

$$\langle \dot{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, J(x,t)\ . \tag{3.35}$$

Durch partielle Integration kann der Strom in (3.35) auch durch $-\int dx\, x\, \partial J(x,t)/\partial x$ berechnet werden. Zusammen mit (3.33) ergibt sich

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{d}{dt} \langle\, x \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, P(x,t)\ , \tag{3.36}$$

was man als eine alternative Definition des Teilchenstroms $\langle \dot{x} \rangle$ betrachten kann.
Für die spezielle stochastische Dynamik (3.23) finden wir durch den Vergleich der Fokker–Planck Gleichung (3.30) mit der Mastergleichung (3.33) den folgenden expliziten Ausdruck für den Wahrscheinlichkeitsstrom [2]

$$J(x,t) = -\left\{ \frac{V'(x)}{\gamma} + \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \right\} P(x,t). \tag{3.37}$$

Durch Einsetzen von (3.37) in (3.35) erhält man wieder (3.32).

3.2.4 Strom im thermodynamischen Gleichgewicht

In Kapitel 2 wurde festgestellt, daß eine gerichtete Bewegung im thermodynamischen Gleichgewicht nicht stattfinden kann. Dies soll hier für das konkrete Modell mathematisch bewiesen werden. Wir müssen uns dabei auch nicht auf den überdämpften Fall beschränken, sondern gehen von der Gleichung (3.21)

$$m\ddot{x}(t) + V'(x(t)) = -\gamma\, \dot{x}(t) + \xi(t) \tag{3.38}$$

aus. Die entsprechende partielle Differentialgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v,x,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\gamma}{m} v - \frac{1}{m} f(x) \right) + \frac{\gamma k_B T}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v,x,t). \tag{3.39}$$

Mit geeigneten Randbedingungen kann (3.39) im stationären Fall gelöst werden. Für die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{st}(v,x)$ ergibt sich als Lösung die Boltzmann-Verteilung,

[2] Dazu kommt zunächst eine additive, von x unabhängige Funktion. Da aber sowohl $J(x,t)$ als auch $P(x,t)$ für $x \to \pm\infty$ gegen Null gehen, muß diese Funktion überall verschwinden.

$$P_{st}(v,x) = N\exp[(-\frac{1}{2}mv^2 + V(x))/k_BT], \tag{3.40}$$

wobei sich die Normalisierungskonstante N aus der Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^L dx P_{st}(v,x) = 1 \tag{3.41}$$

ergibt. Die stationäre mittlere Geschwindigkeit

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^L dx v P_{st}(v,x) = 0, \tag{3.42}$$

verschwindet, und es gibt für beliebige Potentiale $V(x)$ keine gerichtete Bewegung des Brownschen Teilchens. Dies ist verwandt mit dem Prinzip der detaillierten Bilanz. Nur nichtthermische treibende Kräfte können Teilchentransport bewirken, allerdings nur, wenn das Prinzip der detallierten Bilanz verletzt ist.

Kapitel 4

Grundlagen II: Ratschensysteme

Im ersten Teil dieses Kapitels wird versucht, einen Überblick über bisher in der Literatur diskutierte eindimensionale Ratschensysteme zu geben. Dabei sollen die verschiedenen Ratschentypen aus einem möglichst allgemeinen Modell als Spezialfälle abgeleitet werden. Modelle, die sich nicht so klassifizieren lassen, werden in Kapitel 4.1.3 beschrieben.
Die wenigen Arbeiten zu zweidimensionalen Ratschen werden im zweiten Teil dieses Kapitels vorgestellt. Insbesondere behandeln wir dort ein diskretes Modell, das vergleichbar mit einer *flashing ratchet* in zwei Dimensionen ist. Die dabei auftauchenden Probleme führten dazu, daß wir uns kontinuierlichen Modellen zugewandt haben.

4.1 Klassifizierung von Ratschensystemen

Wir wissen aus Kapitel 2, daß eine gerichtete Bewegung in einem Ratschensystem nur auftritt, wenn das System permanent aus dem Gleichgewicht getrieben wird. Dafür muß das in Kapitel 3.2 behandelte minimale Smoluchowski-Feynmann Modell modifiziert werden. Es gibt eine Vielzahl von denkbaren Modifikationen von denen wir qualitativ schon zwei, nämlich das *rocking-ratchet* und das *flashing-ratchet* kennengelernt haben. Im folgenden Kapitel werden wir ein möglichst allgemeines Modell aufstellen, aus dem wir dann die verschiedensten Ratschensysteme als Spezialfälle ableiten können.

4.1.1 Das Arbeitsmodell

Ziel dieses Abschnitts ist der Entwurf eines möglichst allgemeinen Modells zur Beschreibung von Ratschensystemen. Auch in einem allgemeinen Modell müssen dabei die folgenden generellen Prinzipien erhalten bleiben:

1. Wir verlangen räumliche Periodizität und entweder Invarianz oder Periodizität unter Translationen in der Zeit.
2. Alle Kräfte oder Gradienten verschwinden nach der Mittelung über den Raum. Im Falle zeitlicher Periodizität verschwinden sie entsprechend durch Mittelung

über die Zeit und im Falle zufälliger Fluktuationen durch Mittelung über die statistische Gesamtheit.

3. Das System muß ständig aus dem thermischen Gleichgewicht getrieben werden und es dürfen keine Symmetrien vorhanden sein, die den Ratscheneffekt a priori verbieten. Nach dem Prinzip von Curie können wir deshalb generell das Auftreten eines endlichen Teilchenstroms erwarten.

4. Wir betrachten Systeme mit thermischen Rauschen (Gleichgewichtsrauschen einer endlichen Intensität) [1].

Entsprechend dieser einleitenden Bemerkungen betrachten wir das folgende *grundlegende Arbeitsmodell* zur Beschreibung der stochastischen Dynamik eines Teilchens in einer Dimension im überdämpften Fall:

$$\eta\,\dot{x}(t) = -V'(x(t), f(t)) + y(t) + F + \xi(t), \tag{4.1}$$
$$\langle \xi(t)\,\xi(s)\rangle = 2\,\eta\,k_B T\,\delta(t-s). \tag{4.2}$$

Hierbei ist η der Reibungskoeffizient, F ist eine konstante Kraft und $V'(x,f) := \partial V(x,f)/\partial x$. Bezüglich des räumlichen Arguments x ist das Potential periodisch für alle möglichen Argumente $f(t)$,

$$V(x+L, f(t)) = V(x, f(t)). \tag{4.3}$$

Aus denselben Gründen wie in Kapitel 3.2 (siehe auch Anhang B) werden Trägheitseffekte vernachlässigt und thermische Fluktuationen durch unkorreliertes weißes gaußsches Rauschen $\xi(t)$ mit Mittelwert Null und Intensität $2\,\eta\,k_BT$ modelliert.
Weiterhin sollen die Funktionen $f(t)$ und $y(t)$ entweder periodische oder stochastische Funktionen der Zeit t sein. In dem Fall, daß eine oder beide der Funktionen stochastische Prozesse sind, machen wir die vereinfachende Annahme, daß diese Prozesse stationär, und damit im besonderen statistisch unabhängig von dem thermischen Rauschen $\xi(t)$ und dem Zustand $x(t)$ des Systems sind.
Im folgenden wollen wir noch kurz auf den Symmetriebegriff eingehen. Das Potential $V(x, f(t))$ heißt räumlich symmetrisch oder einfach symmetrisch, falls ein Δx existiert, so daß

$$V(-x, f(t)) = V(x+\Delta x, f(t)) \tag{4.4}$$

für alle x und t gilt. Wir benutzen hier die Begriffe „symmetrisch“und „asymmetrisch“als Synonyme für „räumliche Isotropie“bzw. „räumliche Anisotropie“.
Eine weitere wichtige Symmetrie betrifft den Prozeß $y(t)$: Wenn $y(t)$ periodisch in der Zeit ist und ein Δt existiert, so daß $-y(t) = y(t+\Delta t)$ für alle t gilt, dann nennen wir $y(t)$ inversionsymmetrisch oder einfach symmetrisch. Falls $y(t)$ ein stationärer

[1] Zu bemerken ist, daß Punkt 4 keine Konsequenz von Punkt 3 ist. Es gibt z. B. dissipativ getriebene Systeme der Temperatur Null.

stochastischer Prozeß ist, nennen wir ihn symmetrisch, falls alle statistischen Eigenschaften des Prozesses $-y(t)$ die gleichen wie die von $y(t)$ sind. Symbolisch stellt man dies dar durch

$$-y(t) \hat{=} y(t). \tag{4.5}$$

Um Mißverständnissen vorzubeugen sollen hier noch ein paar Bemerkungen zum Sprachgebrauch gemacht werden. Ein asymmetrisches Potential wird auch einfach *Ratschenpotential* genannt. Andererseits nennt man das durch Gleichung (4.1) definierte Modell *Brownscher Motor*, *Ratschendynamik* oder einfach *Ratsche*, und zwar nicht nur wenn das Potential asymmetrisch ist, sondern auch wenn die treibenden Fluktuationen $y(t)$ asymmetrisch sind, das Potential dagegen symmetrisch ist.

4.1.2 Wichtige Ratschentypen

Wie bereits in 3.2 diskutiert wurde, ist eine der wichtigsten Größen im Langzeitverhalten des Systems (4.1) (in Abwesenheit der konstanten Kraft F) der Strom $\langle \dot{x} \rangle$. Wenn sowohl das Potential $V(x, f(t))$ als auch die Funktion $y(t)$ symmetrisch sind, verschwindet der Fluß. Die folgende Klassifizierung der unterschiedlichen Ratschentypen basiert einerseits auf einer systematischen Brechung dieser Symmetrie und andererseits auf der historischen Entwicklung.
Wir können zunächst zwei fundamentale Klassen von Ratschenmodellen aus (4.1) ableiten. Die erste Klasse sind Modelle mit $y(t) \equiv 0$. Sie werden unter dem Begriff *pulsating ratchets* oder *flashing ratchets* zusammengefaßt. Die zweite Klasse sind Modelle mit $f(t) \equiv 0$. Sie werden als *tilting ratchets* oder als *rocking ratchets* bezeichnet [33].
Wir gehen zunächst näher auf die pulsating ratchets ($y(t) \equiv 0$) ein. Eine erste Unterklasse dieses Typs erhält man wenn $f(t)$ in (4.1) additiv ist, d.h.

$$V(x, f(t)) = V(x) \left[1 + f(t)\right] . \tag{4.6}$$

Solche Modelle heißen *fluctuating potential ratchets*. Der Summand 1 ist gebräuchlich, falls wir die Annahme machen, daß $f(t)$ ungerichtet ist. Diese Modellklasse enthält eine spezielle Klasse von Ratschen, nämlich die *on-off ratchets*. In diesem Fall kann $f(t)$ nur die zwei diskreten Werte -1 (Potential aus) und ohne Beschränkung der Allgemeinheit $+1$ (Potential an) annehmen. Eine solche Ratsche haben wir bereits in Kapitel 2.3.1 ausführlich diskutiert. Man erkennt schnell, daß das Potential $V(x, f(t))$ auf der linken Seite von (4.6) nur dann die Symmetriebedingung (4.4) erfüllt, wenn $V(x)$ auf der rechten Seite von (4.6) ebenfalls symmetrisch ist. Weiterhin ist offensichtlich, daß ein symmetrisches Potential $V(x)$ in (4.6), unabhängig von der Wahl von $f(t)$, immer zu einem verschwindenden Fluß $\langle \dot{x} \rangle$ führt. Das einfachste, im Sinne eines gerichteten Transports, nicht-triviale Modell dieser Klasse, erhält man durch die Wahl eines asymmetrischen Potentials $V(x)$ in Kombination mit einem symmetrischen Prozeß $f(t)$.
Eine zweite Unterklasse von pulsating ratchets, bezeichnet als *traveling potential ratchets*, haben Potentiale der Form

$$V(x, f(t)) = V(x - f(t)) \ . \tag{4.7}$$

$V(x)$ ist hier ein periodisches aber nicht notwendigerweise asymmetrisches Potential. Das Potential „wandert “mit einer durch $f(t)$ vorgegebenen Geschwindigkeit entlang der x-Achse. Als einfachstes Beispiel wählt man $f(t) = ut$ (*genuine traveling potential ratchets*). Das Potential ist dann gegeben durch periodisch angeordnete Stufen (lokale Minima des Potentials), die sich mit konstanter Geschwindigkeit entlang der x-Achse bewegen. Man modelliert hier sozusagen einen durch Rauschen beeinflußten Schraubmechanismus. In der Literatur findet man diese Art von Ratschen auch unter dem Begriff *Brownian swimmer* oder *Brownian surfer* [34]. Das Interesse an diesen Ratschensystemen liegt darin begründet, daß hier auch ein symmetrisches Potential zu nicht verschwindendem Strom führt.
Eine dritte Unterklasse der pulsating ratchets ist durch (4.1), (4.3) mit $f(t) \equiv 0$ und $y(t) \equiv 0$ gegeben. Außerdem soll in diesen Modellen die Temperatur von der Zeit (*Seebeck ratchets*) oder vom Ort (*diffusion ratchets*) abhängig sein. Wir haben diese Klasse von Ratschen hier nur der Vollständigkeit halber angegeben.

Kommen wir nun zur zweiten großen Klasse von Ratschen, den tilting ratchets ($f(t) \equiv 0$). Für diese gilt:

$$V(x, f(t)) = V(x). \tag{4.8}$$

Wir betrachten den Fall, daß $V(x)$ ein Ratschenpotential (asymmetrisch) und $y(t)$ symmetrisch ist. Falls $y(t)$ ein stochastischer Prozeß ist, sprechen wir von einem *fluctuating force ratchet*. Der Fall eines periodisch getriebenen tilting ratchets ($y(t)$ ist dann eine periodische deterministische Funktion) ist im Experiment von besonderem Interesse. Diesen Fall haben wir bereits in Kapitel 2.3.2 unter dem Namen *rocking ratchet* kennengelernt.
Im Falle eines symmetrischen Potentials $V(x)$ in (4.8), ist eine Symmetriebrechung von $y(t)$ notwendig und im allgemeinen auch ausreichend für das Auftreten eines endlichen Stroms $\langle \dot{x} \rangle$. Gebräuchlich ist der Name *asymmetrically tilting ratchet*, falls $y(t)$ nicht symmetrisch ist, unabhängig davon ob $y(t)$ eine periodische Funktion oder ein stochastischer Prozeß ist, und auch unabhängig davon ob $V(x)$ symmetrisch ist oder nicht.
Das obige Klassifikationsschema sollte als eine Identifikation von grundlegenden, verschiedenen *minimalen Modellen* verstanden werden. Natürlich sind beliebige Kombinationen und Verallgemeinerungen dieser Modelle möglich, z.B. eine Mischung aus Rocking- und Flashing-Ratchets, oder eine simultane Brechung von mehr als einer Symmetrie. Solche Verallgemeinerungen wurden hier nicht diskutiert, da in solchen Modellen keine fundamental neuen Phänomene erwartet werden [2].

[2] Hierbei ist allerdings Vorsicht geboten. So wurde z.B. in einem Modell, in dem sowohl das Potential als auch das Rauschen asymmetrisch gewählt wurden, eine Stromumkehr festgestellt.

4.1.3 Spezielle Ratschensysteme

In diesem Abschnitt wollen wir auf die Ratschenmechanismen eingehen, die nicht in das obige Klassifikationsschema passen.

Schwach gedämpfte Ratschen

Schwach gedämpfte Ratschen, sogenannte *Inertia Ratchets*, werden vom obigen Klassifikationsschema nicht erfaßt. Hier kann man Trägheitseffekte gegenüber Reibungseffekten nicht mehr vernachlässigen. Inertia Ratchets haben große Relevanz im Hinblick auf Mechanismen zur Trennung von Teilchen. Vor allem in der Biotechnologie stellt die Separation von mesoskopischen Teilchen im großen Maßstab oft ein technologisches Problem dar. Hier könnte ein recht vielversprechendes Gebiet für die erste technologische Anwendung von Ratschensystemen liegen. Eine Möglichkeit zur Trennung von Teilchen basiert auf der Vorzeichenumkehr des Teilchenstroms in Abhängigkeit von dem Parameter nach dem sortiert werden soll, also z.B. in Abhängigkeit von der Teilchengröße, Masse oder Reibung der Teilchen im jeweiligen Medium. Einige wichtige theoretische Arbeiten auf diesem Gebiet findet man beispielsweise in [35, 36, 37, 38]. Zu beachten ist in diesem Zusammenhang besonders, daß bei schwach gedämfter Dynamik ein Übergang von regulärer zu chaotischer Dynamik stattfinden kann [39]. Dies gilt auch für deterministisch getriebene Ratschen. Sie werden in der Literatur als *Hamiltonian Ratchets* [40] bezeichnet. Daraus folgt insbesondere, daß das Verhalten des Systems von den Anfangsbedingungen abhängt. Anwendungsorientierte Beiträge findet man in [41, 42]. Eines der ersten Experimente wird in [43] beschrieben.

Gekoppelte Ratschen

Wenn „einzelne“Ratschensysteme, wie sie im vorherigen Abschnitt betrachtet wurden, miteinander wechselwirken, spricht man von gekoppelten Ratschen. Besonders interessiert ist man an den kollektiven Effekten dieser Ratschensysteme.
Offensichtlich wird aus dem grundlegenden Arbeitsmodell (4.1) in diesem Fall ein Systems von N gekoppelten stochastischen Differentialgleichungen der Form

$$\eta\, \dot{x}_i(t) = -V'(x_i(t), f_i(t)) + y_i(t) + F + \xi_i(t) - \frac{\partial \psi(x_1(t), ..., x_N(t))}{\partial x_i}, \tag{4.9}$$

wobei $i = 1, ..., N$. Dabei ist ψ ein Wechselwirkungspotential, von dem wir annehmen, daß es räumlich homogen und inversionssymmetrisch ist. Dadurch ist gewährleistet, daß durch die eingeführte Wechselwirkung keine Richtung in dem System bevorzugt wird.
Man kann sich vorstellen, daß es für eine Kopplung von Ratschen eine Vielzahl physikalisch plausibler Möglichkeiten gibt. Als ein erstes Modell für die Kopplung wurde in [44] der Einfluß einer Hard-Core-Wechselwirkung, die nur das Überlappen der ausgedehnten Teilchen verhindert, untersucht. In [45] wurden zwei harmonisch über eine Feder gekoppelte Teilchen in einem Ratschenpotential betrachtet. Erstaunlicherweise

wurde dabei ein Anstieg des Teilchenstroms in Abhängigkeit von der Federkonstanten festgestellt. Grundsätzlich besteht die Hoffnung, über Kopplungsmechanismen die Effizienz von Ratschen zu erhöhen. Einen Überblick zu gekoppelten Ratschen findet man in [46].

Quantenratschen

Alle bisherigen Überlegungen betreffen Energien und Temperaturen, bei denen Quanteneffekte keine Rolle spielen und die Teilchen rein klassisch betrachtet werden können. Quantenratschen werden seit etwa 1995 diskutiert [47, 48]. Bei sehr kleinen Temperaturen kann der Tunnelbeitrag zum Transport in periodischen Potentialen wesentlich werden [49, 74]. Relevant sind diese Quantenbeiträge vor allem beim Transport in mesoskopischen Systemen, z.B. in dreieckigen „Quanten-dots“, dem sogenannten Quantenbillard [51]. Eine der zentralen Vorhersagen für Quantenratschen ist eine Stromumkehr beim Übergang vom thermisch aktivierten Regime zum Tunnelregime. Grundlegende Arbeiten zum makroskopischen Quantentunneln findet man z.B. in [52, 53, 54].

Molecular Motors

Unter dem Sammelbegriff *Molecular Motors* finden sich Arbeiten, die sich stark an biologischen Modellen orientieren. Ziel der Arbeiten ist es, Aufschluss darüber zu erhalten, ob elementare Transportmechanismen in biologischen Systemen auf ein Zusammenspiel von gebrochener räumlicher Symmetrie und zeitlich korrelierten Fluktuationen zurückzuführen sind. Wichtige Arbeiten auf diesem Gebiet stammen u.a. von Astumian und Jülicher [55, 56, 57, 58, 59]. Wichtige Experimente, bei denen eine molekulare Bewegung nachgewiesen wird, findet man in [60, 61, 62]. Maddox gibt eine Übersicht über konkrete Modelle zur Beschreibung von Muskelkontraktionen [63, 64, 65]. Siehe dazu auch die Übersicht von Leibler [66].

Die hydrodynamische Ratsche oder auch Driftratsche

Die *hydrodynamische Ratsche* stellt in gewisser Weise einen Sonderfall dar, da das System kein Ratschenpotential besitzt, sondern auf asymmetrischen räumlichen Randbedingungen beruht. Eine Driftratsche besteht aus einem Kanal, dessen Querschnitt periodisch größer und kleiner wird. Diese Querschnittsmodulation besitzt aber keine Reflexionssymmetrie. Durch diesen Kanal wird eine Flüssigkeit, in der sich die zu trennenden Teilchen befinden, periodisch hin und her gepumpt. Im Allgemeinen erfahren die Teilchen einen Drift in Längsrichtung des Kanals, wobei das Vorzeichen empfindlich von den speziellen Parametern wie Anregungsamplitude, Teilchengröße usw. abhängt. Da bei der Driftratsche beliebig viele Ratschen nebeneinander betrieben werden können (parallele Architektur), ist sie ein viel diskutierter Kandidat zur Teilchenseparation im industriellen Maßstab [67].

Für weitergehend Interessierte sei an dieser Stelle auf den kürzlich erschienenen Übersichtsartikel von Reimann verwiesen [46]. Desweiteren findet man im Internet ein Java-Applet zur Funktionsweise eines Brownschen Motors [68]. Dort gibt es auch eine Sammlung von Computeranimationen, welche verschiedene Transportprozesses im Inneren einer Zelle (Molecular Motors) visualisieren [69].

4.2 Zweidimensionale Ratschensysteme

4.2.1 Nochmal Feynmans „ratchet and pawl“

Das in Kapitel 3.2 diskutierte „minimale“ *Smoluchowski-Feynman ratchet* Modell (3.23) gilt nur, falls die Temperaturen in beiden Behältern (siehe Abb. 2.3) gleich sind, d.h. nur wenn sich das Gesamtsystem im thermischen Gleichgewicht befindet (siehe auch Kapitel 2.2). Wir wollen hier den Fall unterschiedlicher Temperaturen $T_2 \neq T_1$ beschreiben. Feynmans thermodynamische Analyse dieses Nichtgleichgewichtsproblems scheiterte an den in Kapitel 2.2 geschilderten Gründen.
Zunächst benötigen wir im Fall unterschiedlicher Temperaturen zwei relevante Koordinaten zur Beschreibung des Systems. Die erste ist ein Winkel, welcher die relative zum Zahnrad eingenommene Position des Sperrhakens angibt. Dazu gehört ein beliebiger Referenzpunkt, der außen auf dem Zahnrad liegt. Wir bezeichnen den Winkel mit $x(t)$ und lassen ihn die gesamte reelle Achse zeitlich durchlaufen. Wie wir in Kapitel 2.2 gesehen haben ist die entscheidende Eigenschaft des Systems, daß die Sperrklinke spontan (aufgrund der thermischen Fluktuationen) vom Zahnrad „abheben “kann. Währendessen kann das Zahnrad frei rotieren. Deshalb ist die „Höhe“ $h(t)$ der Sperrklinke eine andere relevante Koordinate des Systems.
Der nächste Schritt besteht darin, zu erkennen, daß die thermische Umgebung des Flügelrades die Dynamik der Variablen $x(t)$ bestimmt, während das zweite Wärmebad für die Dynamik von $h(t)$ verantwortlich ist. Eine approximative Beschreibung dieser Umgebungseffekte kann gemacht werden, wenn wir sowohl für $x(t)$ als auch für $h(t)$ eine überdämpfte Dynamik annehmen[70, 71]. Dann ergibt sich

$$\eta_1 \dot{x}(t) = -\frac{\partial V(x(t), h(t))}{\partial x} + \xi_1(t), \tag{4.10}$$

$$\eta_2 \dot{h}(t) = -\frac{\partial V(x(t), h(t))}{\partial h} + \xi_2(t), \tag{4.11}$$

mit zwei voneinander unabhängigen weißen gaußschen Wärmebädern [3]

$$\langle \xi_i(t)\, \xi_j(s) \rangle = 2\, \eta_i k_B T_i\, \delta_{ij}\, \delta(t-s), \tag{4.12}$$

mit Temperaturen T_1 bzw. T_2 [13] . Die Wechselwirkung zwischen $x(t)$ und $h(t)$ wird durch das Potential $V(x, h)$ zum Ausdruck gebracht. Es trägt der Tatsache Rechnung, daß die Sperrklinke (schwach) auf das Zahnrad gedrückt wird (z.B. durch eine Feder) und daß die Sperrklinge das Zahnrad nicht durchdringen kann. Letzteres kann durch angemessene Potentialwälle in $V(x, h)$ modelliert werden. Ein explizites Beispiel [70] ist

[3] „Jede Richtung hat ihr eigenes Wärmebad“.

$$V(x,h) = \kappa\, h + \frac{\mu}{h - H(x)}, \tag{4.13}$$

wobei κ die Federkonstante der Sperrklinke ist. $H(x)$ beschreibt das geometrische Profil des Zahnrades und μ ist ein Parameter, der die „Steilheit"der Potentialwälle angibt. Außerdem gilt einschränkend $h > H(x)$.
Zu bemerken ist, daß (4.10) perfekt in unser *fluctuating potential ratchet* Schema paßt (siehe (4.1) mit $y(t) = 0$ und $f(t)$ additiv). Allerdings sind hier die „Potentialfluktuationen"$h(t)$ nicht unabhängig von $x(t)$, vielmehr gibt es eine Rückkopplung durch (4.2).
Trotz der vereinfachenden Annahmen ist dieses Modell nur durch numerische Simulationen lösbar. Detaillierte quantitative Ergebnisse dieser Simulationen findet man in [70, 71]. Die Hauptresultate wurden bereits in Kapitel 2.2 diskutiert. Experimentelle Realisierungen von Feynmans „ratchet and pawl" sind bisher nicht bekannt. Wir haben hier ein Beispiel für ein zweidimensionales Ratschensystem kennengelernt. Im nächsten Abschnitt werden die wenigen bisherigen Arbeiten auf diesem Gebiet vorgestellt.

4.2.2 Bisherige Arbeiten

Als Diskussionsgrundlage sollen uns hier die durch Gleichung [4]

$$\eta\, \dot{x}(t) = -V'(x(t)) + y(t) + \xi(t) \tag{4.14}$$

beschriebenen eindimensionalen *tilting ratchets* dienen. Zweidimensionale Verallgemeinerungen beschränken sich bisher auf diesen Fall. Wir betrachten zunächst vektorielle Verallgemeinerungen von (4.14). Im einfachsten Fall besteht ein zweidimensionales Modell eines Ratschensystems aus zwei völlig unabhängigen Gleichungen der Form (4.14), eine für jede räumliche Dimension x_1 und x_2. Pro forma kann man hier das Potential $V(x_1, x_2)$ einfach als Summe der beiden individuellen Potentiale definieren. Ein derartig beschaffenes System bietet prinzipiell die Möglichkeit, Teilchen mit unterschiedlichen Verhältnissen $\langle \dot{x}_1 \rangle / \langle \dot{x}_2 \rangle$ gemäß ihrer Bewegungsrichtung in der x_1-x_2-Ebene zu trennen.
Eine kompliziertere Situation entsteht, wenn die Dynamik durch ein nichttriviales Potential $V(x_1, x_2)$, das periodisch und/oder asymmetrisch in nur einem oder beiden Argumenten ist, bestimmt wird. Ein Beispiel für eine solche Situation (periodisch in nur einer Komponente) haben wir bereits im Zusammenhang mit Feynmans Ratsche im Kapitel 4.2.1 kennengelernt. Ein anderes Beispiel (periodisch in beiden Komponenten) führt, im Gegensatz zum gewöhnlich linear gerichteten Transport, zu einer zirkularen Bewegung der Teilchen [72, 73]. Dieses Beispiel macht deutlich, daß in zweidimensionalen Systemen auch im stationären Zustand die Notwendigkeit besteht, lokale Flüsse zu betrachten (Offensichtlich verschwindet der globale Fluß im

[4] Sie ergibt sich aus unserem Arbeitsmodell (4.2), indem wir $f(t) \equiv 0$ und $F = 0$ setzen.

obigen Beispiel) [5]. Obige Beispiele zeichnen sich durch relativ einfache Symmetrien aus. Im Prinzip müßte es auch möglich sein, durch geeignet gestaltete zweidimensionale Systeme [74, 75], die Teilchen auf beliebige vorab festgelegte Wege, insbesondere auf für verschiedene Teilchen *unterschiedliche Wege*, zu zwingen.
In [76] wird eine zweidimensionale Potentiallandschaft $V(x_1, x_2)$, bestehend aus einem großen „Tal“entlang der x_1-Achse und periodisch angeordneten „Seitentälern“ endlicher Länge, betrachtet. Falls der Winkel zwischen den „Seitentäler“und der x_1-Achse sich von $\pm\pi/2$ unterscheidet, ist die räumliche Symmetrie entlang der x_1-Achse gebrochen und eine zeitlich periodische Kraft (rocking force) induziert einen endlichen Fluß $\langle \dot{x}_1 \rangle$. Weil dieser Ratscheneffekt auftaucht, obwohl es keine Potentialbarrieren entlang der x_1-Achse gibt ($V(x_1, x_2 = 0) = const$), nennt man dieses System *entropic ratchet*. Legt man zusätzlich eine Kraft F entlang der x_1-Achse an, resultiert ein nichtmonotones Verhalten von $\langle \dot{x}_1 \rangle$ als Funktion von F. Dieses Verhalten bezeichnet man als *negativ resistance*, da man es als klassisches Analogon zum Gleichrichtungseffekt in Tunneldioden auffassen kann. Ähnliche Ratschensysteme wurden in der Biotechnologie zur Trennung von DNA-Molekülen vorgeschlagen [98].
Eine andere Möglichkeit zur Trennung von Teilchen in zweidimensionalen Ratschensystemen werden wir ausführlich in Kapitel 6 besprechen. Dort wird das Potential $V(x_1, x_2)$ so gewählt, daß es periodisch in der x_1-x_2-Ebene angeordnete symmetrische oder asymmetrische Hindernisse modelliert. Die Hindernisse wirken als „Streuzentren“. Unterschiedliche Teilchen werden unterschiedlich stark gestreut und können so separiert werden.

4.2.3 Ein diskretes Modell

Erste Zielsetzung dieser Diplomarbeit war, daß von Kehr im Forschungszentrum Jülich [78] entwickelte diskrete Modell[6] eines eindimensionalen *flashing ratchets* auf zwei Dimensionen zu erweitern. Das erhaltene zweidimensionale Modell konnte dann wie ein Zellularautomaten numerisch untersucht werden. Eine große Anzahl physikalisch unanschaulicher Parameter machte die systematische Auswertung des Modells jedoch sehr schwierig. Deshalb haben wir uns den kontinuierlichen Modellen zugewandt, die den großen Vorteil haben, mit wenigen, physikalisch anschaulichen Parameter auszukommen. Da sich die beiden Vorgehensweisen jedoch stark unterscheiden, wollen wir hier kurz das diskrete Modell vorstellen. Die prinzipielle Idee bei diesem Modell ist die Diskretisierung des Ortes. Der stochastische Prozess wird dann zu einem Sprungprozess.

[5] Besonders interessant wird dieses Beispiel, wenn man an durch Temperaturschwankungen getriebene Ratschensysteme (diffusion ratchets) denkt. Zwingt man in einem solchen System geladene Teilchen auf eine Kreisbahn, so kann man mittels Temperaturschwankungen ein Magnetfeld erzeugen.

[6] Dieses Modell ist ein Spezialfall des von Derrida 1983 entwickelten periodischen eindimensionalen Hüpfmodells [79].

Definition des Modells

Das Modell besteht aus einen eindimensionalen Gitter (einer Kette mit diskreten Plätzen). Ein Gitterpunkt definiert den (diskreten) Ort des Teilchens. Über Hüpfraten ist ein Gitterpunkt mit seinen beiden Nachbarpunkten verbunden. Die Kette kann zwei verschiedene Zustände annehmen, in denen die Hüpfraten unterschiedlich sind. Das Modell ist in Abbildung Abb. 4.1 graphisch dargestellt. Die Hüpfraten sind durch Potentiale visualisiert.

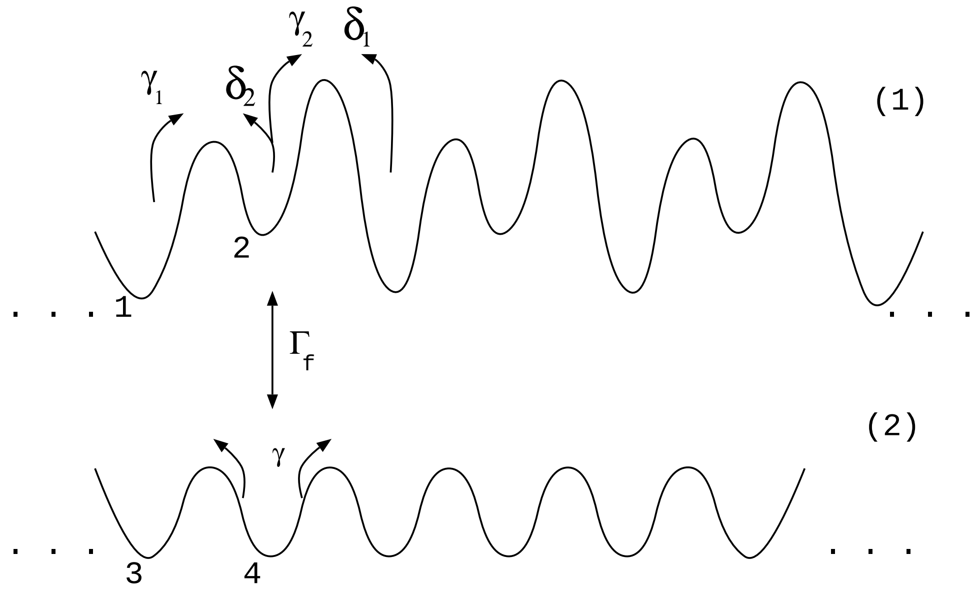

Abbildung 4.1: Durch Potentiale visualisierte Übergangsraten des diskreten Modells

Im Zustand (1) ist das Potential asymmetrisch. Die Plätze mit den Übergangsraten[7] γ_1, δ_1 werden mit 1 bezeichnet, die Plätze mit den Raten γ_2, δ_2 entsprechend mit 2. Der Übergang zu dem anderen Zustand (2) erfolgt in Form eines Poisson Prozesses mit der Rate Γ_f. Ein Teilchen auf einem Platz vom Typ 1 oder 2 im Zustand (1) geht also mit der Rate Γ_f in den Zustand (2) über und „fällt“entsprechend auf einen Platz vom Typ 3 oder 4. Im Zustand (2) haben alle Plätze dieselben Übergangsraten γ zu ihren (linken und rechten) Nachbarplätzen, womit in diesem Zustand das Potential symmetrisch ist. Der Übergang zurück zum asymmetrischen Zustand (1) erfolgt mit derselben Übergangsrate Γ_f. Abschließend fordern wir noch periodische Randbedingungen. Es ist klar, daß wir hier die Periode 2 nehmen müssen, damit ein Teilchenstrom auftritt.

Dies ist eines der wenigen Modelle, in dem man den Strom im stationären Zustand analytisch berechnen kann. Wir definieren $P_1(t)$ als die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t auf Plätzen 1 zu finden. Die Wahrscheinlichkeiten $P_2(t)$, $P_3(t)$ und $P_4(t)$ werden analog definiert. Sie erfüllen die folgenden Mastergleichungen:

[7] Übergänge nach rechts werden mit γ_i und Übergänge nach links mit δ_j bezeichnet.

$$\begin{aligned}
\frac{dP_1}{dt} &= (\gamma_2 + \delta_2)P_2 - (\gamma_1 + \delta_1)P_1, + \Gamma_f(P_3 - P_1), \\
\frac{dP_2}{dt} &= (\gamma_1 + \delta_1)P_1 - (\gamma_2 + \delta_2)P_2, + \Gamma_f(P_4 - P_2), \\
\frac{dP_3}{dt} &= 2\gamma P_4 - 2\gamma P_3 + \Gamma_f(P_1 - P_3), \\
\frac{dP_4}{dt} &= 2\gamma P_3 - 2\gamma P_4 + \Gamma_f(P_2 - P_4). \qquad (4.15)
\end{aligned}$$

Addiert man diese vier Gleichungen, zeigt sich, daß die Summe der Zeitableitungen der vier Wahrscheinlichkeiten verschwindet. Es gilt also $P_1+P_2+P_3+P_4 = const = 1$. Die Summe der ersten und der zweiten Mastergleichung, und die Summe der dritten und der vierten Mastergleichung führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
\frac{d(P_1 + P_2)}{dt} &= \Gamma_f(P_3 + P_4) - \Gamma_f(P_1 + P_2) \\
\frac{d(P_3 + P_4)}{dt} &= \Gamma_f(P_1 + P_2) - \Gamma_f(P_3 + P_4). \qquad (4.16)
\end{aligned}$$

Dieser Satz von Gleichungen zeigt, daß die Zustandswechsel mit der Rate Γ_f stattfinden. Die stationäre Lösung dieser Gleichungen ist $P_1 + P_2 = P_3 + P_4 = 1/2$. Dabei haben wir obige Normalisierungbedingung (Summe über alle Wahrscheinlichkeiten gleich eins) benutzt.

Berechnung des stationären Flusses

Der Fluß von Plätzen vom Typ 1 zu Plätzen vom Typ 2, oder von 3 nach 4, jedenfalls in positiver Richtung ist durch

$$J_{21} = \gamma_1 P_1 - \delta_2 P_2 + \gamma(P_3 - P_4) \qquad (4.17)$$

gegeben. Der Fluß vom 2 nach 1, oder von 4 nach 3 in positiver Richtung ergibt sich zu

$$J_{12} = \gamma_2 P_2 - \delta_1 P_1 + \gamma(P_4 - P_3). \qquad (4.18)$$

Im stationären Fall sind auf Grund der Kontinuitätsgleichnung beide Flüsse gleich, $J_{21} = J_{12} = J$. Mit Gleichung (4.17) und (4.18) und Gebrauch der stationären Werte für die Summen $P_1 + P_2$ und $P_3 + P_4$, erhalten wir eine Gleichung, die die Differenzen $P_2 - P_1$ und $P_4 - P_3$ miteinander in Beziehung setzt,

$$(\gamma_1 + \gamma_2 + \delta_1 + \delta_2)\frac{1}{2}(P_2 - P_1) + 2\gamma(P_4 - P_3) = \frac{1}{4}(\gamma_1 - \gamma_2 + \delta_1 - \delta_2)\,. \qquad (4.19)$$

Eine zweite Gleichung finden wir, indem wir die vierte von der dritten Gleichung des Systems (4.15) abziehen:

$$\Gamma_f(P_2 - P_1) - (4\gamma + \Gamma_f)(P_4 - P_3) = 0\,. \tag{4.20}$$

Das Gleichungssystem für die Differenzen (4.19) und (4.20) ist einfach zu lösen. Nun können wir direkt den stationären Fluß berechnen. Dazu bilden wir die Summe von (4.17) und (4.18), fügen die berechneten Differenzen ein und nutzen die stationären Werte der Summen aus. Der stationäre Fluß ergibt sich dann zu

$$J = \frac{1}{2}\,\frac{\gamma\Gamma_f(\gamma_1+\gamma_2-\delta_1-\delta_2)}{(\gamma_1+\gamma_2+\delta_1+\delta_2)(4\gamma+\Gamma_f)+4\gamma\Gamma_f}\,. \tag{4.21}$$

In der Herleitung der Formel für den stationären Fluß erscheint ein Term im Zähler, der proportional zu $\gamma_1\gamma_2 - \delta_1\delta_2$ ist. Dieser Term verschwindet, da die Kette in jedem ihrer zwei Zustände das Prinzip der detaillierte Bilanz erfüllen soll [8]. Erst die Einführung der Fliprate Γ_f, die Zustandswechsel möglich macht, führt zu einer Verletzung des Prinzips der detaillierten Bilanz, wenn man das Gesamtsystem betrachtet. Diese Verletzung ist also zwingend notwendiger Bestandteil eines Ratschensystems [55].

Diskussion der Ergebnisse

Abb. 4.2 zeigt den Fluß J in Abhängigkeit von der Fliprate Γ_f für eine spezielle Wahl der Übergangsraten. Dabei wurde das analytische Ergebnis (durchgezogene Kurve) durch numerischen Simulationen (Kreuze) abgesichert.
Das Ergebnis zeigt, daß ein nach links gehender Fluß für endliche Werte der Fliprate Γ_f auftritt. Außerdem erkennt man ein Sättigungsverhalten des Flusses. Für $\Gamma_f \gg \gamma$ ergibt sich aus (4.21) für den Fluß der Grenzwert

$$J_{\Gamma_f \gg \gamma} \longrightarrow \frac{1}{2}\,\gamma\,\frac{\gamma_1+\gamma_2-\delta_1-\delta_2}{\gamma_1+\gamma_2+\delta_1+\delta_2+4\gamma}\,. \tag{4.22}$$

Vom kontinuierlichen Modell mit einem asymmetrischen Potential ist ein anderes Verhalten des Flusses bekannt: Dort ist der Fluß maximal für eine optimale Fliprate und verschwindet im Grenzfall großer Flipraten. Das Sättigungsverhalten des Flusses für große Flipraten ist darauf zurückzuführen, daß unser Modell nur zwei Plätze hat. Ein entsprechendes kontinuierliches Modell hätte Bereiche unendlicher Steigung in dem Potential. Ein Maximum des Flusses taucht in diskreten Modellen mit mindestens drei Plätzen auf [80]. Das Verschwinden des Flusses im Grenzfall großer Flipraten verlangt allerdings die Existenz von unendlich vielen Plätzen in einem Segment (Kontinuums-Grenzfall).

[8] Andernfalls wäre das Auftreten eines endlichen Flusses trivial.

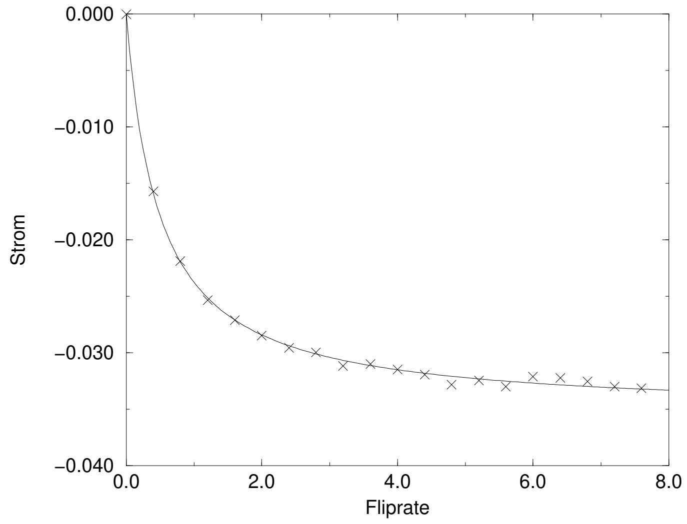

Abbildung 4.2: TeilchenFluß als Funktion der Fliprate Γ_f zwischen den beiden Zuständen. Kurve: analytisches Ergebnis, Symbole: Simulationsergebnis. Die übrigen Parameter sind: $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma \exp(-2)$, $\delta_1 = \gamma \exp(-4)$, $\gamma = \delta_2 = 0.5$.

Verallgemeinerung auf zwei Dimensionen

Das Modell besteht jetzt aus einem zweidimensionalen Gitter, das wiederum zwei Zustände annehmen kann. Jeder Gitterpunkt hat nun vier Nachbarpunkte. Im Zustand (2) wählen wir die Übergangsraten symmetrisch. Wir benötigen dafür wie im eindimensionalen Fall nur eine Rate γ [9]. Im Zustand (1) wählen wir in beiden Richtungen asymmetrische Übergangsraten. In Abb. 4.3 (oben) wurden diese durch ein entsprechendes Potential visualisiert. Die Quader mit grauer Oberfläche (a-g) entsprechen unterschiedlich hohen Potentialbarrieren und die mit schraffierter Oberfläche (1-4) entsprechen den diskreten Orten, an denen sich das Teilchen aufhalten kann. Die Potentialniveaus an den unterschiedlichen Orten dürfen wie im eindimensionalen Fall nicht gleich hoch sein.
Betrachten wir zunächst die Zeile (1,a,2,b,1) in Abb. 4.3 (oben). Dies sei auch gleichzeitig die positive x-Richtung. Sie entspricht genau dem eindimensionalen Fall (siehe Abb. 4.1). Die entsprechenden Übergangsraten findet man in Abb. 4.3 (unten). Die Spalte (1,c,3,g,1) entpricht dann der positiven y-Richtung. Auch hier soll das Potential asymmetrisch sein, womit wir weitere vier Übergangsraten benötigen. Desweiteren benötigen wir acht Übergangsraten um den Platz 4 mit den beiden Plätzen 2 und 3 zu verbinden und umgekehrt. Die entsprechenden Potentialbarrieren (d,e,f,h) wurden aus Übersichtsgründen nicht eingezeichnet. Die Übergangsraten sind durch Pfeile in Abb. 4.3 (unten) dargestellt.
Wir benötigen also ingesamt zur Beschreibung des Zustandes (1) 16 Übergangsraten. Dazu kommt noch die Fliprate und die Rate aus dem symmetrischen Zustand

[9] Das entsprechende Potential für diesen Zustand hat die Form eines „Eierkartons“.

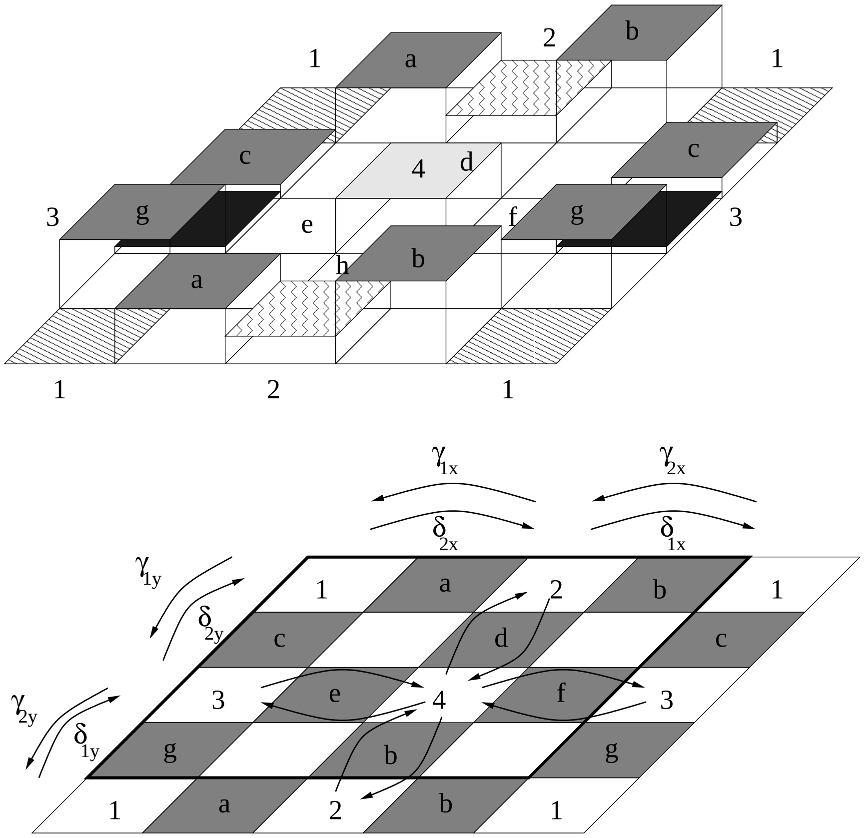

Abbildung 4.3: oben: Visualisierung der Übergangsraten durch ein Potential. Aus Übersichtsgründen wurden die Potentialbarrieren (d,e,f,h) nicht eingezeichnet. Erklärungen findet man im Text. unten: Draufsicht auf die Potentiallandschaft. Grauen Feldern entsprechen wiederrum Potentialbarrieren. Die numerierten weißen Felder entprechen den diskreten Orten und die anderen weißen Felder sind in dem Modell nicht erreichbare Diagonalfelder. Die Übergangsraten sind eingezeichnet.

(2). Allerdings soll auch hier in jedem Zustand das Prinzip der detaillierten Bilanz erfüllt sein. Beispielsweise muß für die Raten von Platz 1 nach 2 und umgekehrt gelten: $\gamma_{1x}\gamma_{2x} - \delta_{1x}\delta_{2x} = 0$. Dasselbe gilt für die Plätze 3 und 4, 4 und 2 und 3 und 1. Dies eleminiert vier Übergangsraten, so daß im allgemeinsten Fall 14 Parameter übrigbleiben.

Aufgrund dieser Vielzahl von Parametern und dem oben beschriebenen modellspezifischen Sättigungseffekt (der natürlich auch in zwei Dimensionen erhalten bleibt) haben wir diesen Ansatz nicht weiter verfolgt. Insbesondere die Suche nach einem Kreisstrom, der wahrscheinlich nur im allgemeinsten Modell (14 Parameter) auftritt, erscheint hier aussichtslos.

Trotz der oben beschriebenen Problem wurde ein Algorithmus zu diesem Modell implementiert. Damit wurde für eine Vielzahl von Parametern der Strom berechnet. Wegen der großen Anzahl von Parametern konnte allerdings keine systematische Auswertung stattfinden.

4.3 Ratscheneffekt in dc SQUIDs

Im II. Physikalischen Institut der Universität zu Köln hat die Herstellung und Untersuchung von dc SQUIDs [10] eine langjährige Tradition. So ergaben sich dort optimale Voraussetzungen, den schon lange bekannten Gleichrichtungseffekt in dc SQUIDs mit ungleichen Josephson-Kontakten [81] im Rahmen eines Ratschenmodells zu interpretieren und geeignete Experimente zur Untermauerung dieser These durchzuführen [7, 8, 9]. Da ein dc SQUID durch zwei gekoppelte stochastische Differentialgleichungen (siehe unten) beschrieben wird, wird man in natürlicher Weise auf ein zweidimensionales Ratschensystem geführt. Die Arbeiten zu dieser Problematik waren für uns der Hauptgrund, zweidimensionale Ratschensysteme zu untersuchen. Obwohl wir uns in dieser Arbeit nicht konkret mit SQUID–Ratschen beschäftigen, wollen wir doch einige Verbindung zu den bisher diskutierten und noch zu diskutierenden Ratschensystemen aufzeigen.

Der Josephson-Kontakt

Bringt man zwei supraleitende Elektroden, deren quantenmechanische Zustände durch makroskopische Wellenfunktionen charakterisiert sind, in Kontakt, so kann es zu einem Überlapp der Wellenfunktionen mit einer endlichen Tunnelwahrscheinlichkeit für die Ladungsträger kommen, wenn die Barrierendicke (d.h. der Abstand zwischen den beiden Elektroden) genügend klein ist. Man spricht dann von einer *schwachen Kopplung* der beiden Supraleiter. Durch diese können Cooper–Paare tunneln, wobei dieser Tunnelprozeß durch die Phasendifferenz δ (im Folgenden kurz: Phase) der Wellenfunktionen über dem Kontakt charakterisiert ist. Die Zusammenhänge zwischen δ und der sogenannten Tunnelstromdichte bzw. der Spannung über dem Kontakt wurden von B.D. Josephson [82, 83] Anfang der 60er Jahre untersucht.

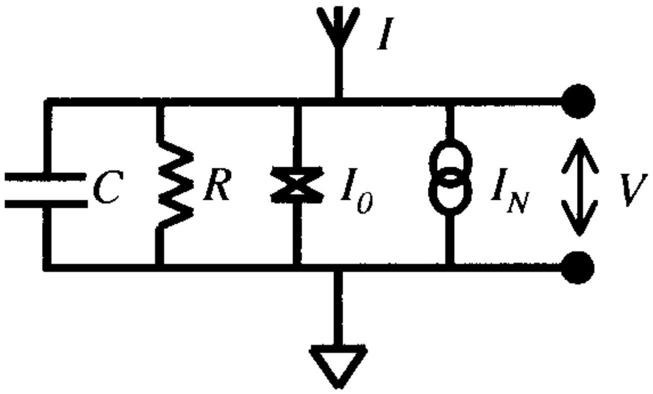

Abbildung 4.4: Ersatzschaltbild eines Josephson–Kontakts im RCSJ–Modell. Entnommen aus [9].

Wir wollen hier nicht auf diesen allgemeinen Fall eingehen, sondern ein vereinfach-

[10]Dies ist eine Abkürzung für *direct current superconducting quantum interference device.*

tes Modell, das sogenannte *Resistively and Capacitively Shunted Junction* (RCSJ) Modell [84, 85] vorstellen, daß den Josephson–Kontakt für die folgenden Zwecke hinreichend genau beschreibt. In diesem Modell wird der reale Josephson–Kontakt durch einen Punktkontakt ersetzt. Zu diesem Punktkontakt sind eine Kapazität C, ein Widerstand R und eine Rauschstromquelle parallel geschaltet (siehe Abb. 4.6). Nach der Kirchhoffschen Regel setzt sich der Gesamtstrom I über den Kontakt aus vier Anteilen zusammen:

$$I = I_C + I_R + I_S + I_N(t) = C\frac{dV}{dt} + \frac{V}{R} + I_0 \sin\delta + I_N(t). \tag{4.23}$$

Dabei ist I_S der Tunnelstrom und $I_N(t)$ der Strombeitrag der Rauschquelle. Mit der zweiten Josephson–Beziehung

$$V(t) = \frac{\Phi_0}{2\pi}\frac{d\delta(t)}{dt} \tag{4.24}$$

ergibt sich daraus folgende Langevin–Gleichung[11]:

$$I = \frac{\Phi_0 C}{2\pi}\ddot{\delta} + \frac{\Phi_0}{2\pi R}\dot{\delta} + I_0 \sin\delta + I_N(t). \tag{4.25}$$

Dabei ist $\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 2.07 \times 10^{-15} Vs$ das magnetische Flußquant mit dem Planckschen Wirkungsquantum h und der Cooper–Paarladung $2e$. Für die Rauschquelle nehmen wir den einfachsten Fall an, nämlich weißes, d.h. thermisches Rauschen. Die Korrelationsfunktion ist entsprechend δ–korreliert.
In formaler Analogie mit der Gleichung (4.25) steht die Kraftgleichung einer Kugel mit Masse m, die sich unter dem Einfluß einer externen Kraft F und der Reibung ξ in einem eindimensionalen Potential $W(x)$ bewegt[12]. Sie lautet:

$$F = m\ddot{x} + \xi\dot{x} - \frac{d}{dx}W(x). \tag{4.26}$$

Ein Vergleich von Gleichung (4.25) mit Gleichung (4.26) führt zu folgender Interpretation:

1. Der Ort x, die Geschwindigkeit $\dot{x}$ und die Beschleunigung $\ddot{x}$ der Kugel entsprechen der Phasendifferenz δ und ihren zeitlichen Ableitungen. Mit Gleichung (4.24) entspricht also insbesondere die Geschwindigkeit der Kugel der Spannung über dem Kontakt.

2. Die Rolle der externen Kraft F übernimmt der Biasstrom I.

[11] Eine detailliertere Herleitung findet man beispielsweise in [9] . Uns kommt es hier auf die Struktur der Gleichung an.

[12] Auf den zur Langevin– Gleichung (4.25) analogen Term F_N wird der Übersicht halber verzichtet.

3. Die Masse m der Kugel entspricht der Kapazität C des Josephson–Kontakts.

4. Der Reibungskoeffizient ξ entspricht im Josephson–Kontakt dem Leitwert $1/R$.

5. Schließlich läßt sich der Gradient $\frac{d}{dx}W(x)$ mit $I_0 \sin\delta$ identifizieren.

Die gesamte potentielle Energie U_J des Josephson–Kontakts ist gegeben durch das sogenannte „gekippte Waschbrettpotential“[13]

$$U_J = -E_J(\cos\delta + \frac{I}{I_0}\delta). \tag{4.27}$$

Dabei ist $E_J \propto I_0$ die Josephson–Kopplungsenergie. Damit wird auch Punkt 5 der Auflistung klar.

Die dc SQUID–Gleichungen

Ein dc SQUID ist ein supraleitender Ring der Induktivität L, der von zwei Josephson–Kontakten unterbrochen ist (siehe Abb. 4.29). Für die folgende Betrachtung wird der kapazitive Term aus Gleichung (4.25) vernachlässigt[14].

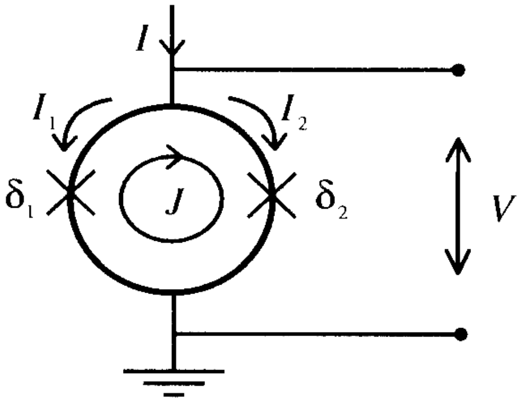

Abbildung 4.5: Das dc SQUID: Ein supraleitender Ring der Induktivität L, der von zwei Josephson–Kontakten unterbrochen wird. Angelegt wird ein Strom I und ein externer Fluß Φ_a, der zu einem Ringstrom J führt. Die Spannung V wird parallel über beide Kontakte gemessen. Entnommen aus [9].

Indiziert man die Phasendifferenz δ, den kritischen Strom I_0, den Widerstand R und den thermischen Rauschstrom des linken Kontakts mit 1 und die entsprechenden Größen des rechten Kontakts mit 2, so erhält man folgende Gleichungen:

[13] Die Herleitung findet man in [9] und den dort aufgeführten Referenzen.

[14] Im mechanischen Analogon wird entsprechend der Trägheitsterm vernachlässigt (überdämpfter Grenzfall).

$$
\begin{aligned}
V &= \frac{\Phi_0}{2\pi}\frac{\dot{\delta}_1 + \dot{\delta}_2}{2}, && (4.28)\\
I_1 &= \frac{\Phi_0}{2\pi R_1}\dot{\delta}_1 + I_0^1 \sin\delta_1 + I_N^1, && (4.29)\\
I_2 &= \frac{\Phi_0}{2\pi R_2}\dot{\delta}_2 + I_0^2 \sin\delta_2 + I_N^2. && (4.30)
\end{aligned}
$$

Gleichung (4.28) ist analog zur Gleichung (4.24), d.h. sie setzt die Spannung über das SQUID mit den Phasengeschwindigkeiten der beiden Kontakte in Beziehung. Die Gleichungen (4.29) und (4.30) sind die RSJ–Gleichungen[15], wobei für die Ströme über die Kontakte

$$I_1 = I/2 - J \;\text{ und }\; I_2 = I/2 - J, \qquad (4.31)$$

bzw. für den Ringstrom

$$J = \frac{I_1 - I_2}{2} \qquad (4.32)$$

gilt. Die beiden stochastischen Differentialgleichungen sind also über den Ringstrom gekoppelt. Eine weitere Gleichung zur Beschreibung des SQUIDs ist notwendig und folgt aus der Eindeutigkeit der Wellenfunktion[16] und der damit verbundenen Fluß–Quantisierung. Insgesamt gilt[17]:

$$2\pi n = \delta_1 - \delta_2 - \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}. \qquad (4.33)$$

Dabei setzt sich der totale Fluß Φ aus dem extern angelegten Fluß Φ_a und dem vom Ringstrom J erzeugten Fluß zusammen:

$$\Phi = \Phi_a + LJ. \qquad (4.34)$$

Anstelle der Induktivität gibt man bei einem SQUID sinnvollerweise eine normierte Induktivität, den sogenannten Abschirmparameter $\beta_L = I_C L/\Phi_0$ an, wobei $I_C = I_0^1 + I_0^2$ der gesamte kritische Strom ist.

[15] Stark gedämpfte Kontakte werden als RSJ–Kontakte bezeichnet. Hier kann die Kapazität C vernachlässigt werden. Im mechanischen Analogon entspricht das einer masselosen Kugel, die keine kinetische Energie speichern kann.

[16] Die Phase der Wellenfunktion darf sich auf einem beliebigen geschlossenen Weg nur um ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ändern.

[17] Man wählt den geschlossenen Weg gerade auf dem SQUID-Ring.

Zweidimensionales Potentialmodell

Auch die Dynamik eines dc SQUIDs läßt sich im Rahmen eines Potentialmodells verstehen. Das System hat im Gegensatz zu einem Einzelkontakt allerdings zwei Freiheitsgrade δ_1 und δ_2, weshalb es sich um ein zweidimensionales Potential handelt. Das SQUID–Potential U_S ergibt sich durch Integration aus den zeitunabhängigen Anteilen der Gleichungen (4.29), (4.30) und (4.34) und man findet unter Verwendung des normierten angelegten Flußes $f_a = \frac{\Phi_a}{\Phi_0}$

$$U_S(\delta_1, \delta_2) = -\frac{\Phi_0}{2\pi}\left\{I_0^1 \cos\delta_1 + I_0^2 \cos\delta_2 - \frac{I_C}{4\pi\beta_L}[\delta_1 - \delta_2 - 2\pi f_a]^2 + \frac{I}{2}(\delta_1 + \delta_2)\right\}. \tag{4.35}$$

Für symmetrische Kontakte $I_0^1 = I_0^2 = I_0 = I_C/2$ vereinfacht sich Gleichung (4.35) zu

$$U_S(\delta_1, \delta_2) = -\frac{I_C\Phi_0}{2\pi}\left\{\frac{1}{2}\cos\delta_1 + \frac{1}{2}\cos\delta_2 - \frac{1}{4\pi\beta_L}[\delta_1 - \delta_2 - 2\pi f_a]^2 + \frac{i}{2}(\delta_1 + \delta_2)\right\}. \tag{4.36}$$

Hierbei wurde der normierte Strom $i = I/I_C$ verwendet. Das SQUID-Potential beinhaltet drei wesentliche Bestandteile:

1. Die Beiträge aus der Josephson–Kopplungsenergie der beiden Kontakte $\propto \cos\delta_1$ und $\propto \cos\delta_2$.

2. Den Term aus der magnetischen Kopplungsenergie des SQUID–Rings $\propto (\delta_2 - \delta_1)^2$.

3. Den Beitrag aus der äußeren „Kraft“$\propto (\delta_1 + \delta_2)$.

In Abb. 4.6 ist das normierte Potential $u_S = \frac{U_S 2\pi}{I_C\Phi_0}$ für die Parameter $\beta_L = 12$, $i = 0$ und $\Phi_a = 0$ dargestellt. Die Form erinnert an einen periodisch deformierten „Eierkarton“, wobei die Talsohle längs der Richtung $\hat{\delta_1} + \hat{\delta_2}$ verläuft [18]. Ein Biasstrom kippt das Potential in Richtung $\hat{\delta_1} + \hat{\delta_2}$ und ein angelegtes Feld verschiebt das Minimum des Potentials in Richtung $\hat{\delta_1} - \hat{\delta_2}$. Es bietet sich daher an, eine Koordinaten–Transformation durchzuführen:

$$\delta = (\delta_1 + \delta_2)/2, \tag{4.37}$$
$$\varphi = (\delta_1 - \delta_2)/2. \tag{4.38}$$

Mit Gleichung (4.28) ist die Spannung über das SQUID in diesen Koordinaten gegeben durch $V = \frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\delta}$. Das normierte Potential vereinfacht sich dann zu

[18] $\hat{\delta_i}$ bezeichnet die Einheitsvektoren der jeweiligen Richtung.

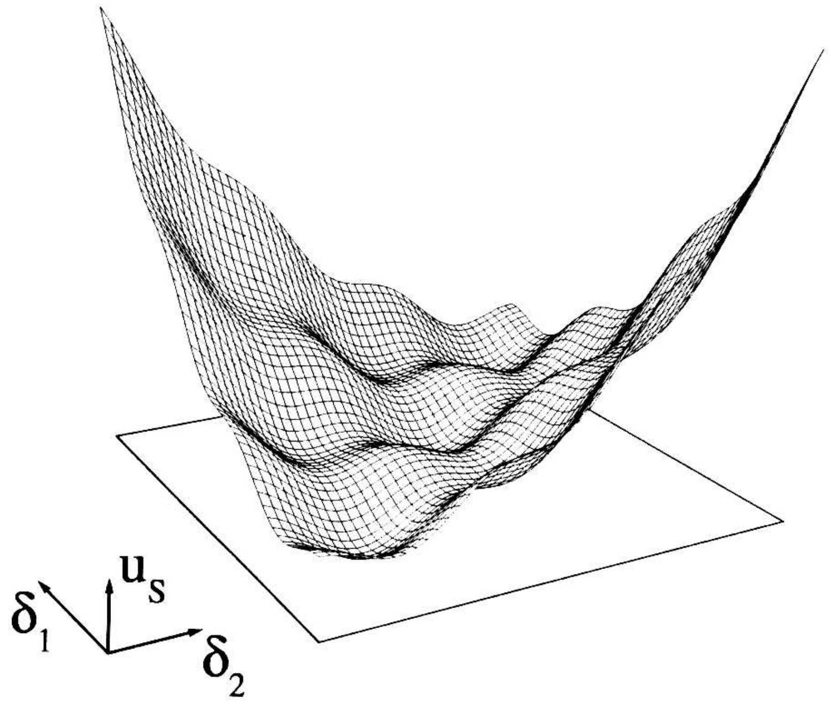

Abbildung 4.6: Normiertes dc SQUID–Potential u_S über den Phasendifferenzen (δ_1, δ_2) der beiden symmetrischen Josephson–Kontakte ohne Biasstrom und ohne angelegtes magnetisches Feld. Entnommen aus [9].

$$u_S(\delta, \varphi) = -\cos\delta\cos\varphi + \frac{1}{\pi\beta_L}\{\varphi - \pi f_a\}^2 - i\delta. \tag{4.39}$$

Gleichung (4.39) kann zur Untersuchung der Dynamik von *symmetrischen* SQUIDs verwendet werden. Im nächsten Abschnitt wird diese Gleichung auf die Beschreibung von dc SQUIDs mit ungleichen Josephson–Kontakten erweitert. Zuvor muß jedoch die Frage geklärt werden, welche Symmetriebrechung im zweidimensionalen Potential in Analogie zur Brechung der Reflexionssymmetrie in einem eindimensionalen Potential betrachtet werden muß.

Reflexionssymmetrie in zwei Dimensionen

Zunächst ist zu beachten, in welcher Richtung der Transport erfolgt [19]. Bei einem gewöhnlichen experimentellen Aufbau eines SQUIDs wird nur die Spannung, die über das SQUID abfällt, beobachtet. Mit $V = \frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\delta}$ ist klar, daß nur der Transport längst der Koordinate δ experimentell zugänglich ist. Für das SQUID–Potential[20] w_S

[19] Der Begriff Transport bezieht sich hier auf den Phasentransport in Josephson–Systemen.

[20] w_S ist das totale SQUID–Potential abzüglich des Terms aus der äußeren Kraft, d.h. $w_S = u_S(\delta, \varphi) + i\delta$.

muß deshalb die Reflexionssymmetrie bezüglich der Koordinate, in der der Transport stattfindet, gebrochen sein. Die erste Forderung an ein SQUID–Ratschenpotential lautet deshalb:

$$w_S(\delta - \delta_0, \varphi) \neq w_S(-\delta - \delta_0, \varphi) \tag{4.40}$$

für alle δ_0 aus $[0, 2\pi]$. Eine weitere Bedingung lautet:

$$w_S(\delta - \delta_0, \varphi - \varphi_0) \neq w_S(-\delta - \delta_0, -\varphi - \varphi_0) \tag{4.41}$$

für alle δ_0, φ_0 aus $[0, 2\pi]$. Das SQUID–Ratschenpotential darf nicht invariant unter der Paritätstransformation $(\delta, \varphi) \to (-\delta, -\varphi)$ sein[21].
Es liegt also genau ein Ratschensystem vor, wenn $w_S(\delta, \varphi)$ die beiden Bedingungen (4.40) und (4.41) erfüllt[22].

Asymmetrisches dc SQUID

Asymmetrien spielen bei der Beschreibung von SQUIDs oft eine wesentliche Rolle, da sie bei der Herstellung schwer zu vermeiden sind und ihre Eigenschaften unter Umständen stark beeinflussen. Wir unterscheiden zwei grundsätzlich verschiedene Arten von Asymmetrien:

1. Kontaktasymmetrie aufgrund von unterschiedlichen Josephson–Kontakten; siehe Abb. 4.7 (a).

2. Eigenfeldeffekt[23], z.B. aufgrund von unterschiedlichen Induktivitäten in den beiden SQUID–„Armen“; siehe Abb. 4.7 (b).

Zur Herleitung des Potentials für asymmetrische Kontakte beschränken wir uns auf die Betrachtung einer Asymmetrie in den kritischen Strömen α_I, d.h.

$$I_0^1 = (1 - \alpha_I) I_0 \ \text{ und } \ I_0^2 = (1 + \alpha_I) I_0 \tag{4.42}$$

Sowohl die Normalwiderstände als auch die Kapazitäten beider Kontakte sollen gleich sein. Mit diesen Annahmen ändern sich an den dynamischen Gleichungen des dc SQUIDs lediglich die Potentialbeiträge und analog zu Gleichung (4.39) läßt sich für ein SQUID mit asymmetrischen kritischen Strömen ein Potential in den Koordinaten (δ, φ) angeben. Für das Potential ergibt sich:

$$u_S(\delta, \varphi) = -\cos\delta\cos\varphi + \alpha_I \sin\delta\sin\varphi + \frac{1}{\pi\beta_L}\{\varphi - \pi f_a\}^2 - i\delta. \tag{4.43}$$

[21] Beide Bedingungen werden in [9] ausführlich plausibel gemacht.
[22] Das Potential (4.39) kann offensichtlich die Bedingung (4.40) nicht erfüllen. In einem symmetrischen SQUID ist demnach kein Ratscheneffekt zu erwarten.
[23] Auf diese Art von Asymmetrie wollen wir hier nicht eingehen; siehe dazu [9].

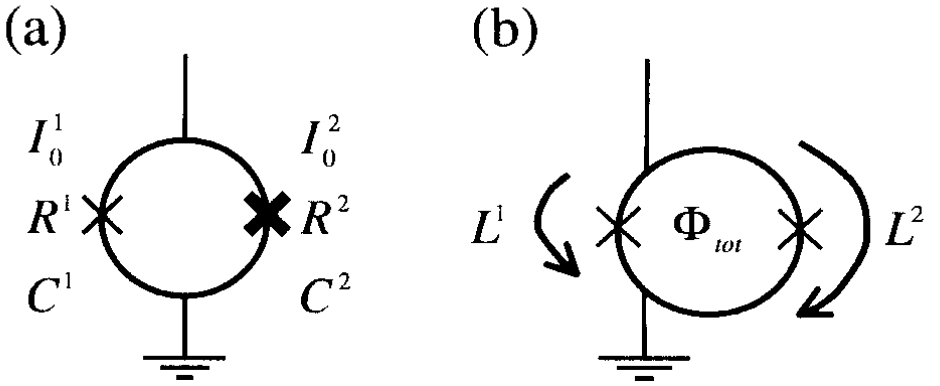

Abbildung 4.7: Zwei mögliche Ursachen für die Entstehung von Asymmetrien im dc SQUID: (a) die beiden Josephson–Kontakte sind unterschiedlich; (b) eine Asymmetrie in der Induktivität führt zur Erzeugung eines Eigenfeldes. Entnommen aus [9].

Dieses Potential erfüllt die Bedingungen (4.40) und (4.40), falls

$$f_a \neq \frac{n}{2} \text{ und } \alpha_I \neq 0 \tag{4.44}$$

simultan erfüllt sind. Das SQUID muß also von einem externen Fluß f_a durchsetzt werden, der ungleich einem ganzzahligen Vielfachen von $\frac{\Phi_0}{2}$ ist, und der Asymmetrieparameter α_I muß von Null verschieden sein.
Bei einem SQUID mit gegebener Asymmetrie α_I kann also die Symmetrie des Potentials sehr einfach über den externen Fluß eingestellt werden. Die Veranschaulichung des Ratschenpotentials analog zum eindimensionalen Fall stellt in zwei Dimensionen ein gewisses Problem dar, da das Potential längs einer Lösung (δ, φ) des Systems von Differentialgleichungen betrachtet werden muß, diese Trajektorie jedoch vom jeweiligen Biasstrom abhängt. Es ist jedoch instruktiv die „schrittweise" Brechung der Reflexionssymmetrie eines SQUID–Potentials zu betrachten, wenn sukzessive Asymmetrie und Fluß verändert werden. Dazu betrachten wir in Abb. 4.8 die Äquipotentialliniendarstellung des SQUID–Potentials w_S über den Koordinaten (δ, φ).
Das symmetrische SQUID $\alpha_I = 0$ (obere Reihe) ohne angelegten Fluß $f_a = 0$ besitzt sowohl Spiegelungssymmetrie bezüglich δ als auch Invarianz unter der Paritätstransformation. „Schaltet" man einen externen Fluß an, gilt letzteres nicht mehr. Die Spiegelungssymmetrie wird erst gebrochen, wenn man asymmetrische Kontakte $\alpha_I = 0.3$ (untere Reihe) einführt.
Daß diese Symmetriebrechung zu einem Ratscheneffekt führt, läßt sich auch im Potential erkennen, das mit einem Biasstrom $\pm i$ verkippt wird. In Abb. 4.9 ist in der oberen Reihe ein symmetrisches SQUID und in der unteren ein asymmetrisches SQUID dargestellt. Der angelegte Fluß beträgt $f_a = 0.25$. Für den Fall $\alpha_I = 0$ ist der Biasstrom so gewählt, daß keine lokalen Minima existieren, d.h. die Differentialgleichung ergibt eine ungebundene Lösung für δ. Für diesen Strom befindet sich das symmetrische dc SQUID also im Spannungszustand. Man erkennt, daß sich die

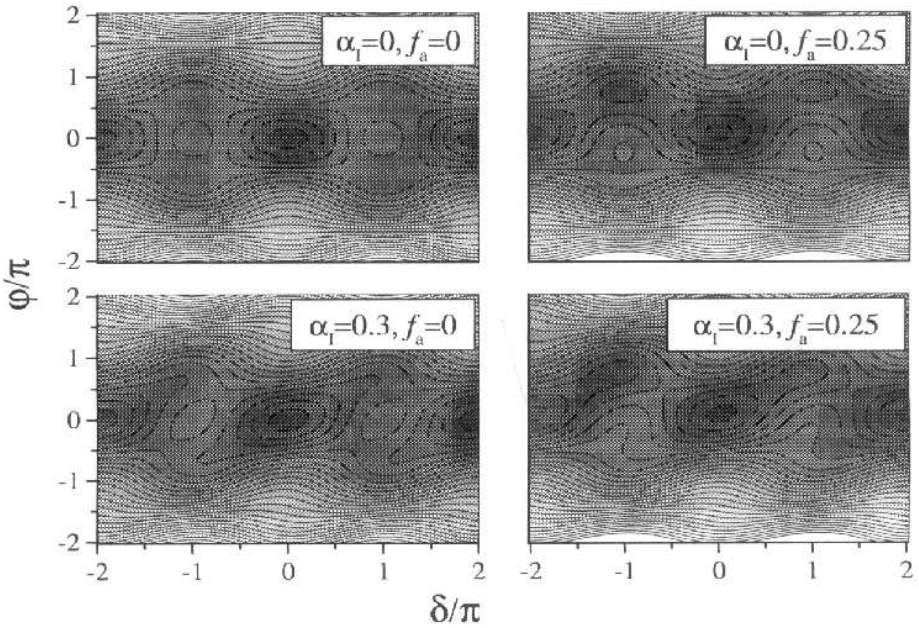

Abbildung 4.8: Äquipotentiallinien des SQUID–Potentials w_S ($\beta_L = 1.5, i = 0$) für ein symmetrisches SQUID (obere Reihe) und ein asymmetrisches SQUID (untere Reihe) bei entsprechenden externen Flüssen f_a. Die Graustufen geben die Höhe des Potentials wieder und verlaufen von kleineren Werten (dunkler) zu größeren Werten (heller). Entnommen aus [9].

Potentiale der oberen Reihe durch Spiegelung an der Achse mit $\delta = const.$ ineinander überführen lassen.
Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die beiden Potentiale im asymmetrischen Fall (untere Reihe) erheblich. Für positiven Biasstrom sind sämtliche lokalen Minima verschwunden, d.h. auch hier befindet sich das SQUID im Spannungszustand. Für negativen Biasstrom dagegen sind im Potential noch lokale Minima vorhanden. Dies bedeutet jedoch auch immer eine Lösung mit $\dot{\delta} = 0$, d.h. es fällt keine Spannung über das SQUID ab. Der Biasstrom ist kleiner als der kritische Strom des asymmetrischen SQUIDS bei $f_a = 0.25$.
In den Arbeiten von S. Weiss et al. [9, 7, 8] ist also gezeigt worden, daß der Gleichrichtungseffekt in dc SQUIDs auf einem Ratscheneffekt beruht. Desweiteren wurde u.a. die Abhängigkeit des Effekts von den relevanten Systemparametern untersucht. Insbesondere wurden die notwendigen Bedingungen gefunden, unter denen ein dc SQUID diesen Gleichrichtungseffekt zeigt.

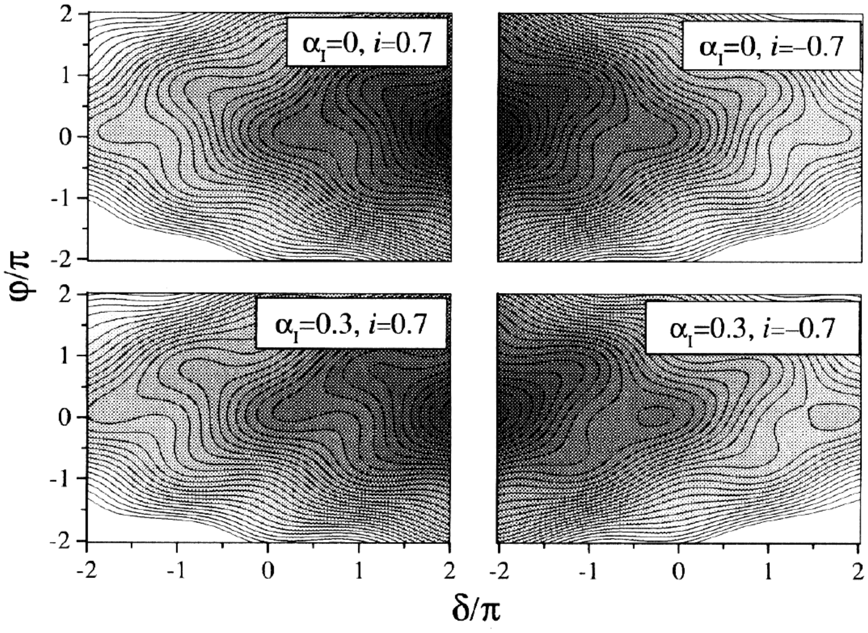

Abbildung 4.9: Äquipotentiallinien des SQUID–Potentials ($\beta_L = 1.5, f_a = 0.25$) mit externer Kraft $u_S = w_S - i\delta$ für ein symmetrisches SQUID (obere Reihe) und ein asymmetrisches SQUID (untere Reihe) für positiven Biasstrom (linke Spalte) und negativen Biasstrom (rechte Spalte). Entnommen aus [9].

Kapitel 5

Numerische Methoden

In Kapitel 5.1 wird der von uns benutzte Algorithmus zur numerischen Lösung gekoppelter stochastischer Differentialgleichungen vorgestellt. Im wesentlichen beruht der Algorithmus darauf, die exakte Lösung durch eine stochastische Taylorentwicklung (siehe [86]) zu approximieren. Dieser Algorithmus ist prinzipiell ausreichend zur Untersuchung des in dieser Arbeit betrachteten kontinuierlichen Modells. Allerdings ist er sehr rechenzeitintensiv, so daß wir nicht in der Lage waren, den vollen Parameterbereich des Modells zu untersuchen. Vor wenigen Monaten wurde ein völlig anderer Algorithmus vorgeschlagen. In diesem wird die Fokker–Planck Gleichung durch Finite–Elemente Methoden numerisch gelöst. Obwohl wir diesen Algorithmus aus Zeitmangel nicht mehr implementiert haben, wollen wir ihn in Kapitel 5.2 kurz vorstellen. Insbesondere ist man mit diesem Algorithmus in der Lage, lokale Flüsse (in vertretbarer Zeit) zu berechnen.

5.1 Computersimulationen von stochastischen Differentialgleichungen

Ein wichtiger Aspekt beim Studium stochastischer Differentialgleichungen ist deren näherungsweise Lösung durch numerische Simulationen, sogenannte Monte-Carlo-Simulationen. Betrachten wir zunächst einen Satz von N solcher Differentialgleichungen

$$\dot{x}_i = f_i(x_1, ..., x_n, t) + \sum_{j=1}^{N} \sqrt{2D_{ij}}\Gamma_j(t) + \sum_{j=1}^{N} b_{ij}\xi_j(t). \tag{5.1}$$

Dabei sind $\Gamma_i(t)$ und $\xi_j(t)$ Zufallskräfte, also nicht näher charakterisierte stochastische Prozesse. Die $f_i(x_1, ..., x_n, t)$ sind deterministische (und bekannte) Kräfte.
Vom numerischen Standpunkt aus unterscheidet man zwei Klassen von zufälligen Kräften (Rauschen): die mit einer endlichen Korrelationszeit und die delta-korrelierten (die Korrelationsfunktion ist proportional zur Diracschen Deltafunktion). Die erste Klasse von Prozessen ist numerisch leicht zu behandeln. Für das gerade benötigte Zeitintervall wird eine Realisierung des stochastischen Prozesses mit Hilfe eines

Zufallszahlengenerators gebildet. Ist diese Realisierung einmal vorhanden wird die Lösung des Systems (5.1) einfach durch die Lösung eines gewöhnlichen Sytems deterministischer Differentialgleichungen erzielt (Man benutzt dann z. B. das Euler-Verfahren oder die Runge-Kutta-Methode). Die einzige Einschränkung für diese Vorgehensweise besteht darin, daß ein zeitlicher Integrationsschritt kleiner als die Korrelationszeit des Rauschens sein muß. Da die Zeitskala eines delta-korrelierten Prozesses infinitesimal klein ist, erfordert dieser Prozeß eine spezielle Behandlung.

Standardalgorithmus

Betrachten wir zunächst folgende einfache stochastische Differentialgleichung:

$$\dot{x} = f(x) + \sqrt{2D}\Gamma(t), \quad f(x) = -\frac{dV(x)}{dx}. \tag{5.2}$$

Dabei ist $\Gamma(t)$ ein gaußscher Prozeß:

$$\langle\Gamma(t)\rangle = 0, \quad \langle\Gamma(t)\,\Gamma(s)\rangle = \delta(t-s). \tag{5.3}$$

Wir integrieren nun die Gleichung (5.2) von t_i nach $t_{i+1} = t_i + h$ mit der Schrittweite $h > 0$. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \dot{x}dt &= x(t_{i+1}) - x(t_i) \\ &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(x(t))dt + \sqrt{2D}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \Gamma(t)dt. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Wenn h hinreichend klein ist, können wir das erste Integral auf der rechten Seite approximieren und erhalten in erster Näherung

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(x(t))dt \approx f(x_i)h, \tag{5.5}$$

wobei $x_i = x(t_i)$ ist. Das ist einfach ein Integrationsschritt nach dem Euler-Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen. Für das zweite Integral erhalten wir

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \Gamma(t)dt = W(t_i + h) - W(t_i) = \sqrt{h}N(0,1). \tag{5.6}$$

Dabei ist $W(t)$ ein spezieller stochastischer Prozeß, der sogenannte Wienerprozeß. Wir benutzen hier die Tatsache, daß der Wienerprozesses [30] ein Integral des gaußschen weißen Rauschens ist. $N(0,1)$ ist eine gaußverteilte Zufallsvariable mit verschwindendem Mittelwert und Standardabweichung eins. Wir brauchen zur numerischen Realisierung einen Zufallszahlengenerator, der in jedem Zeitschritt eine

gaußverteilte Zufallszahl berechnet.
Somit erhalten wir die folgende Approximation von (5.2):

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + f(x_i)h + \sqrt{2Dh}N(0,1) + O(h^{3/2}). \tag{5.7}$$

Der Algorithmus besteht also aus einer Schleife und generiert eine Sequenz von Zahlen x_i. Wegen des konstanten Integrationsschrittes $t_i = t_0 + ih$ müssen wir uns nicht an den Zeitpunkt t_i erinnern. Dieser Algorithmus ist der einfachst mögliche Algorithmus zur Erzeugung einer Realisierung (einer Trajektorie) der SDGL (5.2). Natürlich gibt es auch Algorithmen höherer Ordnung [86, 87, 88] , z.B. das stochastische Runge-Kutta Verfahren. Kompliziertere Algorithmen arbeiten mit einer variablen Schrittweite, um in Bereichen, in der sich die Trajektorie stark verändert, genauer zu sein. Dies sind die auch bei gewöhnlichen Differentialgleichungen bekannten Extrapolationsverfahren. Diese Algorithmen haben aber den gravierenden Nachteil, daß sie mit zunehmender Ordnung des Verfahrens immer rechenzeitintensiver werden.
Zur Berechnung der durchschnittlichen dimensionslosen Geschwindigkeit $\langle v \rangle = \langle dx/dt \rangle = J$ des Teilchens in einer Realisierung benutzen wir die Formel $v_n = (x_n - x_0)/t_n$. Dabei ist n die Anzahl der Iterationen.

Verallgemeinerung auf zwei Dimensionen

Betrachten wir nun das System stochastischer Differentialgleichungen aus Kapitel 6.3.1:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + \xi_x(t) \quad , \\ \dot{y} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + \xi_y(t) \quad . \end{aligned} \tag{5.8}$$

Hiebei ist sowohl $\xi_x(t)$ als auch $\xi_y(t)$ gaußsisches weißes Rauschen mit verschwindendem Mittelwert und der Korrelationsfunktion $\langle \xi_x(t)\xi_y(t') \rangle = 2k_B T \delta_{xy} \delta(t-t')$. k_B ist dabei die Boltzmann-Konstante und T die absolute Temperatur. Die Kopplung der beiden Freiheitsgrade findet also ausschließlich über das Potential $V(x,y)$ statt.
Wir benutzen nun den Algorithmus der Ordnung 3/2 [89] zur Simulation von (5.8) und erhalten damit

$$\begin{aligned} x(t+\triangle t) &= x(t) + f_1 \triangle t + \frac{1}{2}(f_1 \frac{\partial f_1}{\partial x} + f_2 \frac{\partial f_1}{\partial y}) \triangle t^2 \\ &+ \Gamma_1^{(1)}(t) + \frac{\partial f_1}{\partial x}\Gamma_1^{(2)}(t) + \frac{\partial f_1}{\partial y}\Gamma_2^{(2)}(t) \quad , \end{aligned} \tag{5.9}$$

$$\begin{aligned} y(t+\triangle t) &= y(t) + f_2 \triangle t + \frac{1}{2}(f_2 \frac{\partial f_1}{\partial y} + f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x}) \triangle t^2 \\ &+ \Gamma_2^{(1)}(t) + \frac{\partial f_2}{\partial y}\Gamma_2^{(2)}(t) + \frac{\partial f_2}{\partial x}\Gamma_1^{(2)}(t) \quad . \end{aligned} \tag{5.10}$$

Dabei bedeuten

$$f_1 = -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x}, \quad f_2 = -\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} \tag{5.11}$$

und

$$\begin{aligned} \Gamma_i^{(1)}(t) &= \sqrt{2k_B T \triangle t}\omega_i^{(1)} \quad , \\ \Gamma_i^{(2)}(t) &= \sqrt{2k_B T \triangle t}\triangle t(\frac{1}{2}\omega_i^{(1)} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\omega_i^{(2)}) \quad . \end{aligned} \tag{5.12}$$

Die Zufallsvariablen $\Gamma_i^{(j)}(i,j=1,2)$ sind vier unkorrelierte gaußsche Zufallszahlen mit verschwindendem Mittelwert und Standardabweichung eins.
Wir können nun den Fluß einer Realisierung in x– und in y–Richtung wie im eindimensionalen Fall ausrechnen. Die Anzahl der Iterationen haben wir auf etwa $n = 10^5$ festgelegt. Nun müssen wir noch über die einzelnen Realisierungen mitteln. Die Anzahl der Realisierungen liegt bei uns in der Größenordnung $m = 10^4$. Wir mußten bei der Festlegung von m und n einen Kompromiß zwischen benötigter Rechenzeit[1] und Genauigkeit des Algorithmus finden. Zur Bestimmung obiger Werte haben wir Simulationsergebnisse unseres Algorithmus der Ordnung 3/2 mit Ergebnissen von Algorithmen höherer Ordnung (insbesondere dem stochastischen Runge–Kutta Verfahren) verglichen. Zur Bestimmung der Genauigkeit des Algorithmus haben wir u. a. die Tatsache ausgenutzt, daß im thermodynamischen Gleichgewicht ($F = 0$ in (6.15)) der Fluß verschwinden muß.

5.2 Finite-Element Methode

Die Finite-Element Methode (FEM) ist eine flexible numerische Methode zur Lösung partieller Differentialgleichungen (PDE). Die attraktivste Eigenschaft dieser Methode ist der intuitive Zugang zu geometrisch komplizierten Bereichen. Außerdem ist es einfach, Verfahren höherer Ordnung [90, 91, 92] zu konstruieren. Wir wollen hier das Basiskonzept kurz vorstellen und auf die Smoluchowski-Gleichung (6.16) anwenden.

5.2.1 Generelle Formulierung

Wir nehmen an, daß uns eine PDE in der Form

$$Lu = g \tag{5.13}$$

vorliegt, wobei L ein linearer Operator, g eine gegebene Funktion und u eine unbekannte Funktion ist. Die Finite-Element Methode sucht nach Approximationen für

[1] Typische Rechenzeiten belaufen sich auf bis zu 90 Stunden CPU–Zeit auf einem UltraSPARC IIi Prozessor mit 440 MHz.

das unbekannte u, indem diese Funktion nach lokalen Funktionen $N_j(x)$ entwickelt wird:

$$\hat{u} = \sum_{j=1}^{M} u_j N_j(x). \tag{5.14}$$

Die $N_j(x)$ heißen Basis– oder Formfunktionen und sind typischerweise vorgegeben. Die unbekannten Koeffizienten u_j sind so zu bestimmen, daß $\hat{u} \approx u$ gilt.
Der Weg zur Bestimmung der u_j führt über das Residuum [2]

$$R(u_1, ..., u_M, x) = L\hat{u} - g. \tag{5.15}$$

Gesucht wird ein $\hat{u}$ derart, daß R klein ist. Da die N_j vorgegeben sind, müssen wegen (5.14) M Bestimmungsgleichungen für die $u_1, ..., u_M$ aufgestellt werden. Hierzu wird das Residuum durch Einführung von M Gewichtsfunktionen $W_1, ..., W_M$ gewichtet. Man verlangt

$$\int_\Gamma RW_j dx = 0 \;\; f\ddot{u}r \;\; j = 1, ..., M, \tag{5.16}$$

wobei dx als Symbol für die zum Definitionsbereich $\Gamma \subset \mathbb{R}^M$ passende Integration steht. Das Gleichungssystem (5.16) besteht aus M Gleichungen

$$\int_\Gamma L\hat{u}W_j dx = \int_\Gamma gW_j dx \;\; (j = 1, ..., M) \tag{5.17}$$

für M Unbekannte u_j, die in $\hat{u}$ stecken. Für (5.17) verwenden wie die praktische Skalarproduktschreibweise

$$(L\hat{u}, W_j) = (g, W_j). \tag{5.18}$$

Wenn L linear ist, ergibt sich wegen (5.14)

$$\int_\Gamma L\hat{u}W_j dx = \int_\Gamma (\sum_i u_i LN_i) W_j dx = \sum_i u_i \int_\Gamma LN_i W_j dx = \sum_i u_i a_{ij}. \tag{5.19}$$

Setzen wir die $a_{ij} := \int LN_j W_j dx$ zu einer Matrix A zusammen und die $r_j := \int gW_j dx$ zu einem Vektor r, so resultiert ein lineares Gleichungssystem für den Vektor $u = (u_1, ..., u_M)^T$:

$$Au = r \tag{5.20}$$

[2]Das Verfahren ist bekannt als das Prinzip der gewichteten Residuen.

Über die Basisfunktionen N_j und die Gewichtsfunktionen W_j haben wir noch nicht verfügt. Wegen der Wahlfreiheit sind diverse Methoden möglich. Wir nehmen an, daß die jeweiligen Funktionen so oft wie nötig differenzierbar oder integrierbar sind. Wir wählen hier für die Gewichtsfunktionen $W_j = N_j$. Die Methode wird dann Galerkin's Methode genannt[3] [92]. Die Festlegung der Basisfunktionen erfolgt im nächsten Kapitel anhand des konkreten Problems.

5.2.2 Anwendung auf die Smoluchowski-Gleichnung

Wie betrachten jetzt speziell die Smoluchowski–Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(x,y,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x}(f_x(x,y)P(x,y)) - \frac{\partial}{\partial y}(f_y(x,y)P(x,y)) \\
&+ D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,y) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}P(x,y),
\end{aligned} \tag{5.21}$$

die wir durch die Notationen

$$\begin{aligned}
\partial_i &= \frac{\partial}{\partial x_i}, \;\; x_1 = x, \;\; x_2 = y, \\
\mathbf{f} &= (f_1, f_2) = (f_x, f_y), \\
\mathbf{J} &= (J_1, J_2) = (J_x, J_y),
\end{aligned} \tag{5.22}$$

folgendermaßen schreiben können [4]:

$$\partial_k J_k = 0. \tag{5.23}$$

Für die Gewichtsfunktion $N_i = N_i(x,y)$ ergibt sich für das Skalarprodukt (5.18):

$$\begin{aligned}
(R, N_i) &= (\partial_k J_k, N_i) = \int_\Gamma d\mathbf{x} \partial_k J_k N_i \\
&= -\int_{\partial\Gamma} ds_k J_k N_i + \int_\Gamma d\mathbf{x} J_k \partial_k N_i,
\end{aligned} \tag{5.24}$$

wobei s_k eine Komponente des Normalenvektors der Oberfläche $\partial\Gamma$ ist. Das erste Integral kann bei periodischen Randbedingungen vernachlässigt werden. Es liefert nur bei natürlichen Randbedingungen einen Beitrag. Nutzen wir jetzt die explizite Formel für J_k und verlangen eine Lösung der Form $P^0(x,y) = \sum_{j=1} p_j N_j(x,y)$, so erhalten wir mit der Galerkin–Methode:

$$\begin{aligned}
A_{ij} &= 0, \text{ wobei} \\
A_{ij} &= \int_\Gamma d\mathbf{x} f_k \partial_k N_i N_j - D_k \int_\Gamma d\mathbf{x} \partial_k N_i \partial_k N_j.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

[3] Die gewichtete Residuen-Methode mit $W_j \neq N_j$ wird häufig als Petrov-Galerkin-Formulierung bezeichnet.

[4] Über gleiche Indizes wird summiert.

Der nächste Schritt besteht in der Wahl der Basisfunktionen N_i und der Berechung der Matrix A. Zuerst konstruiert man ein Gitter (für dieses Problem würde sich ein rechteckiges anbieten) im Definitionsbereich Γ. Dann können wir die Funktionen $N_i(x,y)$ als lineare Funktion eines Untergitters i und null außerhalb dieses Untergitters definieren. Wir bezeichnen das Untergitter i als ein Element des Gesamtgitters. Mit dieser Wahl kann die Berechnung eines Matrixelementes A_{ij} auf eine Integration einzelner Elemente reduziert werden (anstatt über den ganzen Bereich Γ). Die Koeffizienten in der Entwicklung $P^0(x,y) = \sum_{j=1} p_j N_j(x,y)$ sind dann einfach die Werte von $P^0(x,y)$ auf den zugehörigen Knoten des Gitters.
Der hier betrachtete Fall der Smoluchowski–Gleichung mit periodischen Randbedingungen unterscheidet sich vom Standardfall. Wir müssen hier explizit die Periodizität und die Normierung der Lösung berücksichtigen.

$$\sum_i p_i = 1, \quad p_a = p_b \text{ für einige Paare } (a,b). \tag{5.26}$$

Es ist klar, daß die Matrix sehr groß werden kann. Betrachtet man beispielsweise ein zweidimensionales Problem mit 10^4 Testfunktionen (was äquivalent zu einem quadratischen 100×100 Gitter ist) hat die Matrix A die Größe $10^4 \times 10^4$. Ohne periodische Randbedingungen hat die Matrix Bandstruktur. Die Periodizität der Lösung zerstört diese Eigenschaft. Trotzdem bleibt die Matrix nur dünn besetzt, so daß es möglich ist, nur besetzte Diagonalen der Matrix abzuspeichern. Deshalb bieten sich iterative Methoden [90, 93, 94] zur Lösung des linearen Gleichungssystems an.
Trotz des hohen numerischen Aufwands ist dieser Algorithmus ca. 100 mal schneller, als eine Simulation der stochastischen Differentialgleichungen. Insbesondere die Suche nach Kreisströmen (bzw. nach geschlossenen Strömen) scheint mit diesem Algorithmus sehr aussichtsreich zu sein.

Kapitel 6

Neue Mechanismen zur Teilchenseparation: Zweidimensionale Ratschen

Die Erfahrung mit den diskreten Modell (siehe Kapitel 4.2.3) führt dazu, daß wir uns nun der Untersuchung der in der bisherigen Forschung kaum behandelten *kontinuierlichen* zweidimensionalen Systeme zuwenden. Ein Vorteil des kontinuierlichen Modells im Vergleich zu dem diskreten ist ein relativ kleiner Satz von Modellparametern, deren physikalische Bedeutung unmittelbar klar ist. Der Algorithmus zur Beschreibung der Systemdynamik ist zwar relativ kompliziert und rechenzeitintensiv, erlaubt aber eine systematische Untersuchung des Stroms in Abhängigkeit von den Parametern.
Wir haben ein kontinuierliches zweidimensionales Ratschenmodell zur Separation von Teilchen weiterentwickelt und modifiziert. Die Wahl dieses Modells und insbesondere die Festlegung des Ratschenpotentials wird durch einige bestehende Modelansätze zur Teilchenseparation ausführlich motiviert.

6.1 Motivation

Die Verfügbarkeit technischer Methoden zur Trennung von Makromolekülen (z.B. Proteine, DNA) hat eine entscheidende Bedeutung im Bereich der Molekularbiologie. Bisher wurde die Gelelektrophorese als ein Standardwerkzeug für diesen Zweck eingesetzt. Der Mechanismus der Gelelektrophorese beruht darauf, daß die zu trennenden Teilchen in einem gelartigen Medium [1] unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes eine gerichtete Diffusionsbewegung ausführen (siehe [95]). Die Geschwindigkeit der Teilchen ist in diesem Fall durch die lineare Beziehung

$$\mathbf{v}(M_s) = \mu_e(M_s)\mathbf{E} \tag{6.1}$$

[1] Die Struktur solcher Medien kann beliebig kompliziert sein. Allen gemeinsam ist eine hohe Viskosität.

gegeben, wobei $\mathbf{v}(M_s)$ die Geschwindigkeit eines Teilchens der Masse M_s, μ_e die Mobilität und $\mathbf{E}$ das elektrische Feld sind. Die Trennung der Teilchen basiert auf der Abhängigkeit der Mobilität der Teilchen von deren Massen.[2] Dieses Verfahren ist jedoch bei vielen Teilchensorten (z.B. DNA) nicht anwendbar. Häufig liegt das Problem darin, daß sich die Mobilitäten unterschiedlicher Teilchen nicht genügend unterscheiden.
Um dieses Problem zu meistern, wurden alternative Techniken vorgeschlagen [96, 97, 98, 99, 100]. Neuerdings eingeführte mikrolithographische Techniken machen es möglich, Brownsche Ratschen zur Teilchenseparation zu nutzen. Zunächst wird ein zweidimensionales Feld von mikroskopisch kleinen Hindernissen auf einen Silikonchip geätzt (siehe Abb. 6.1).

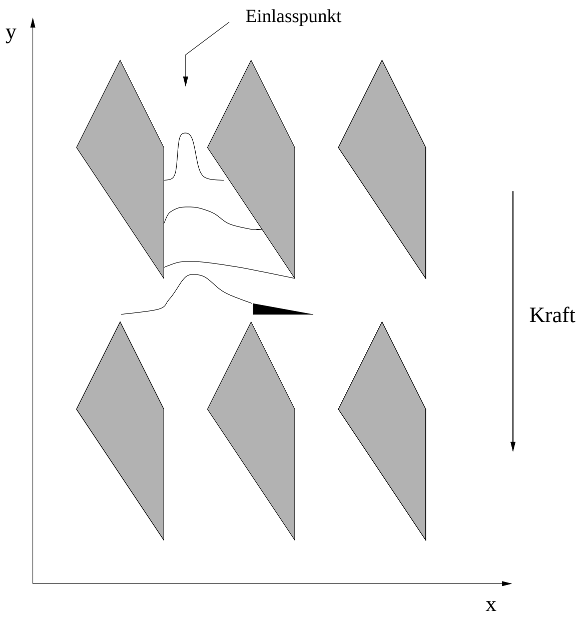

Abbildung 6.1: Veranschaulichung der Dynamik eines Teilchens in der im Text beschriebenen Anordnung. Die Hindernisse sind in beiden Richtungen asymmetrisch. Die eingezeichneten Kurven stellen die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Teilchens dar. Die schwarz markierte Fläche ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, mit der das Teilchen eine Reihe weiter nach rechts gelangt.

Dieser wird mit einem Medium, das die Teilchen enthält, gefüllt und dann versiegelt. Wenn die Anordnung der Hindernisse sowohl in x– wie auch in y–Richtung asymmetrisch ist, kann eine konstante Kraft in x– bzw. y–Richtung eine Drift der Teilchen in y– bzw. x–Richtung bewirken. Die Stärke der Drift hängt stark von der Mobilität und der Diffusionskonstanten der Teilchen ab. Die Teilchen werden einfach unterschiedlich stark in eine Richtung schräg zur Kraft abgelenkt und können so mit einer wesentlich besseren Auflösung als bei der Gelelektrophorese getrennt werden. Experimentell werden die Teilchen an einem Punkt am Rande des Siebes in das System eingelassen und nachdem sie das Sieb durchlaufen haben in einer

[2] Teilchen mit hoher Mobilität diffundieren schneller in Richtung des elektrischen Feldes als Teilchen mit niedriger Mobilität.

bestimmten Region abhängig von der Mobilität und der Diffusionskonstanten der Teilchen wieder herausgenommen. Für kleine Kräfte ist die Kopplung zwischen der Kraft und dem schräg zur Kraft induzierten Drift linear.
Der große Vorteil dieser Methode liegt darin, daß die Form der Hindernisse beliebig gewählt werden kann. Außerdem kann das Sieb wiederverwendet werden und die Teilchen können kontinuierlich sortiert werden. Solch ein Verfahren kann einfach automatisiert werden. Allerdings hat es auch zwei gravierende Nachteile. Der Durchfluss des Systems ist beschränkt, weil die Teilchen nur mit einer niedrigen Rate an einem festen Punkt in das System eingebracht werden können. Der zweite Nachteil bezieht sich auf die Systemgröße. Um eine gute Auflösung zu erzielen, müssen mehrere tausend Spalten von Hindernissen gebildet werden. Eine Verbesserung der Auflösung, die proportional zur Wurzel aus der Systemgröße ist, ist mit diesem Verfahren also sehr schwierig. Zur Beseitigung obiger Nachteile wurde das Verfahren von

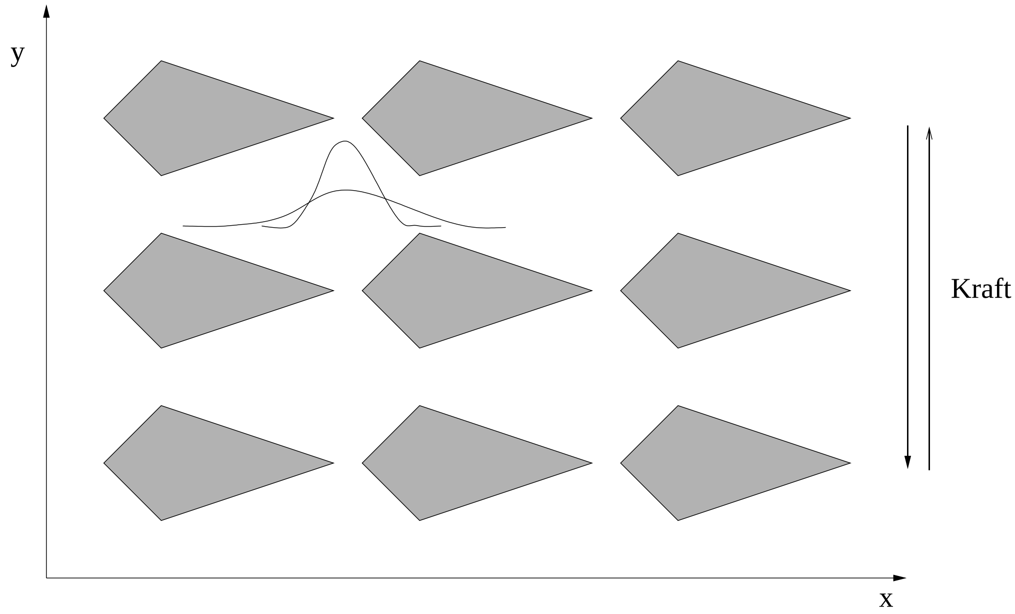

Abbildung 6.2: Schematische Illustration des im Text beschriebenen Systems. Hier sind die Hindernisse in y-Richtung reflexionssymmetrisch; in x-Richtung bleibt die Reflexionssymmetrie weiterhin gebrochen. Zur Veranschaulichung des Separationsmechanismusses sind zusätzlich die Wahrscheinlichkeitsverteilungen zweier Teilchen unterschiedlicher Masse eingezeichnet.

Derenyi und Astumian modifiziert [101]. Sie entwarfen ein System, das in y-Richtung reflexionssymmetrisch ist (siehe Abb. 6.2). In einem solchen System induziert eine konstante Kraft in y-Richtung eine Drift der Teilchen in x-Richtung, und zwar unabhängig vom Vorzeichen der Kraft. Deshalb wird eine treibende konstante Kraft mit periodisch alternierendem Vorzeichen eine konstante Drift in x-Richtung und eine verschwindende Nettogeschwindigkeit der Teilchen in y-Richtung produzieren. Andererseits wird eine Kraft in x-Richtung keinen Drift der Teilchen in y-Richtung produzieren. Im Gegensatz zum ersten Modell mit komplett asymmetrischen Hindernissen verschwinden hier die linearen Kopplungskoeffizienten. Die Frequenz, mit

der die Kraft ihr Vorzeichen wechselt, sollte groß genug sein, um den Teilchen das Passieren einiger Reihen von Hindernissen zu ermöglichen, aber auch klein genug, damit die verglichen mit der Systemgröße in y-Richtung zurückgelegte Distanz klein bleibt. Mit dieser Technik kann die Systemgröße parallel zur treibenden Kraft relativ klein sein und die Auflösung steigt kontinuierlich mit der (Wurzel aus der) Zeit.
Solche technischen Betrachtungen führten zu dem Konzept einer geometrische Ratsche. Diese scheint dem flashing-ratchet zu gleichen, wenn man die zeitliche Änderung des Potentials durch eine räumliche Änderung ersetzt und eine konstante treibende Kraft annimmt. Im weiteren wird aber sichtbar, daß eine geometrische Ratsche wesentlich komplizierter als ein flashing-ratchet ist, und sich beide nur in einem kleinen Parameterbereich vergleichen lassen.
Diskutieren wir das Problem zunächst vom Standpunkt der linearen Response-Theorie. Hat man in einem System zwei unabhängige Kräfte, so lautet die Onsager-Beziehung [102]:

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Im Fall der Elektrophorese sind die Kräfte X_1 und X_2 elektrische Felder in x- und y-Richtung, und die Flüsse J_1 und J_2 sind Drifts der Teilchen in x- bzw. y-Richtung. In einem freien Gel gibt es keine Kopplung zwischen dem Fluß J_1 und der Kraft X_2 und umgekehrt. Das bedeutet, daß die Drift der Teilchen immer parallel zum angelegten Feld stattfindet. Beim Einbau der Hindernisse tritt eine Kopplung auf. Die Kraft X_2 bzw. E_y bewirkt einen Teilchenfluß in x-Richtung, also $L_{12} \neq 0$. Wenn die Kopplung linear wäre, müßte nach der Onsager-Relation $L_{12} = L_{21}$ gelten. Für symmetrische Hindernisse (siehe Abb. 6.2) kann die Kraft X_1 aber keinen Fluß in y-Richtung bewirken (also $L_{21} = 0$). Daraus muß der Schluß gezogen werden, daß das Sytem rein nichtlinear reagiert (also mindestens quadratisch). Lineare Reaktionen geben in diesem Fall keinen Beitrag. Dann sind die Onsager-Relationen nicht länger gültig und es bietet sich folgender Ansatz an:

$$J_1 = L_{11} X_1 \ , J_2 = L_{21} {X_1}^2 . \tag{6.3}$$

Dieser Ansatz erlaubt zur selben Zeit $L_{21} = 0$ und $L_{12} \neq 0$. Der quadratische Term ermöglicht die Erzeugung eines gerichteten Flusses J_2 durch eine alternierende Kraft X_1.
Eine Situation, in der insbesondere für kleine Parameter keine linearen Abhängigkeiten vorliegen, ist nicht besonders häufig. Im Bereich stochastischer Ratschen ist allerdings noch ein anderes Beispiel bekannt. Betrachten wir eine eindimensionale Ratsche, die durch dichotome Fluktuationen[3] getrieben wird. Von besonderem Interesse ist hier die Abhängigkeit des Flusses von der Korrelationszeit τ. In [103] konnte gezeigt werden, daß für kleine Korrelationszeiten der Fluß folgende Form annimmt:

[3]Ein dichotomer Prozeß ist ein diskreter Markov-Prozeß, der nur zwei Zustände annehmen kann. Fluktuationen zwischen den Zuständen werden durch zwei zeitunabhängige Ratenkonstanten beschrieben.

$$J = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{A}{\tau}}. \tag{6.4}$$

Dabei ist A eine Konstante. Für kleine τ kann dieser Term nicht in eine Reihe entwickelt werden. Folglich existiert auch kein linearer Term in τ.
Im folgenden Abschnitt werden wir zwei Beispiele für nichtlinear gekoppelte Flüsse anführen. In diesen Systemen bewirken die Kräfte das Auftreten eines Flusses senkrecht zur Richtung der Kraft.

6.2 Zwei Beispiele für nichtlinear gekoppelte Flüsse

Wir diskutieren zwei Beispiele kontinuierlicher zweidimensionaler Ratschensysteme. Das Ratschenpotential dieser Systeme hat die Eigenschaft, daß es in einer Richtung reflexionssymmetrisch ist; in der anderen Richtung ist diese Symmetrie jedoch gebrochen.

6.2.1 Ein makroskopisches Beispiel

Betrachten wir zunächst ein makroskopisches Beispiel für ein zweidimensionales Ratschensystem. In Abb. 6.3 ist ein Schnitt durch ein in beiden Richtungen periodisches Röhrensytem skizziert.
Die Röhren sind zylinderförmig. Wir bezeichnen die Querschnittsflächen der Röhren in vertikaler Richtung mit A_1 bzw. A_2 jeweils für die breiten bzw. schmalen Röhren. Die Röhren sind so angeordnet, daß ein schmales Röhrensegment von jeweils zwei breiten Röhrensegmenten benachbart wird und umgekehrt. In horizontaler Richtung sind ebenfalls kleine Verbindungsröhren angebracht, die die breiten Röhren auf der linken Seite mit den schmalen auf der rechten Seite verbinden.
Nun wird in vertikaler Richtung eine Flüssigkeit durch das System gepumpt. Die Kontinuitätsgleichung verlangt $J_y = v_1 A_1 = v_2 A_2$, wobei J_y der Fluß in vertikaler Richtung ist. v_1 und v_2 sind die mittleren Geschwindigkeiten in der breiten bzw. schmalen Röhre. Die Flüssigkeit fließt also in der schmalen Röhre schneller wodurch nach dem Bernoulli-Prinzip ein Unterdruck bzw. Sog

$$\triangle P = P_1 - P_2 = \frac{1}{2}\rho({v_2}^2 - {v_1}^2) \tag{6.5}$$

entsteht. Hier ist ρ die Dichte der Flüssigkeit und P_1 bzw. P_2 sind die Drücke in den breiten bzw. schmalen Röhren. Der vertikale Fluß führt somit also zu einem kleinen horizontalen Fluß.
Um den Fluß ständig aufrecht zu erhalten, muss über jede Periode ein zusätzliches $\triangle P$ aufgewendet werden. Zur Vereinfachung nehmen wir an, daß $\triangle P$ im Vergleich zu P_1 und P_2 vernachlässigt werden kann. Für hinreichend kleine Drücke ergibt sich $J_y \approx \triangle P$, also $v_i \approx \triangle P / A_i$. Wenn die horizontalen Verbindungsröhren hinreichend klein sind, kann der Fluß in x-Richtung nach Poiseuilles Formel für viskose Flüsse [102] bestimmt werden:

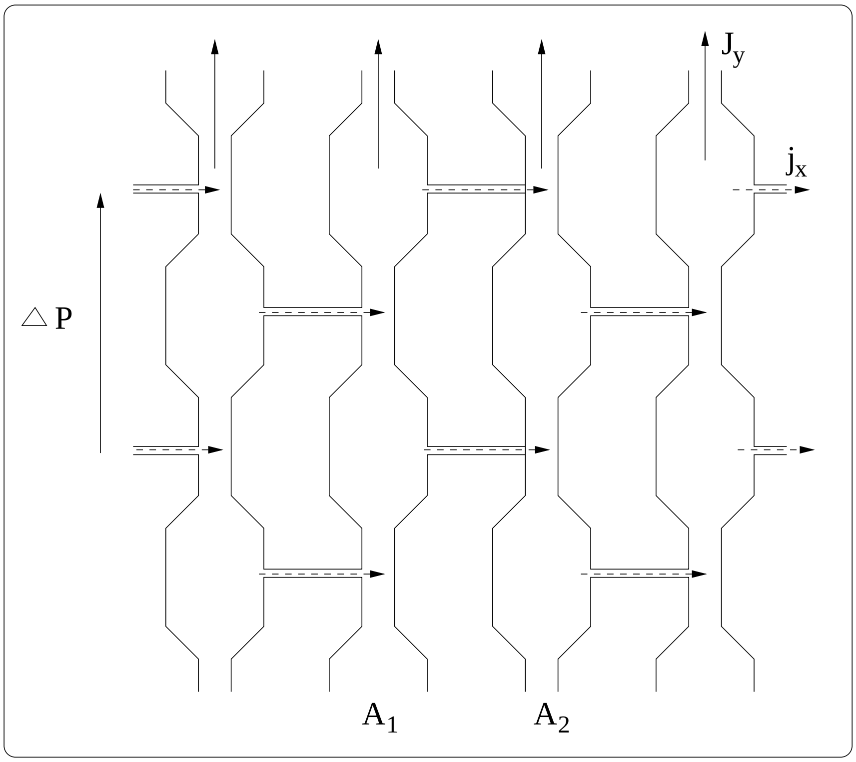

Abbildung 6.3: Ein zweidimensionales Röhrensystem: Wenn Flüssigkeit in vertikaler Richtung gepumpt wird, entsteht wegen des Bernoulli-Prinzips auch ein von links nach rechts gehender horizontaler Fluß.

$$j_x = \frac{\pi r^4}{8 l \nu}(P_1 - P_2) = \frac{\pi r^4 \rho}{16 l \nu}(v_2^2 - v_1^2) \approx (\triangle P)^2. \tag{6.6}$$

Hierbei ist l die Länge der Röhre, r deren Radius und ν eine Viskositätskonstante. Gleichung (6.6) zeigt, daß j_x proportional zu $(\triangle P)^2$ ist. Man erkennt, daß dieses System allgemein durch den Ansatz (6.3) beschreibbar ist. Dies sieht man nicht nur durch obige algebraische Rechung, sondern auch durch Symmetrieüberlegungen. Durch die Reflexionssymmetrie in vertikaler Richtung führen abwärts und aufwärts gerichtete Flüsse zu einem identischen horizontalen Fluß. Der horizontale Fluß muß deshalb eine gerade Funktion des vertikalen Druckes sein. Im Zusammenhang mit (6.3) bedeutet dies, daß L_{21} verschwindet. Dies impliziert im Sinne der Überlegungen des vorigen Abschnitts, daß L_{12} ebenfalls verschwindet. Eine Kopplung erscheint also erst in zweiter oder höherer Ordnung. Es sei noch einmal betont, daß die notwendige Bedingung für dieses Verhalten die räumliche Anisotropie in horizontaler Richtung des Systems ist.

6.2.2 Brownsches Teilchen im Hindernisparcours

Als Vorbereitung auf das im nächsten Kapitel 6.3 aufgestellte Modell wollen wir hier ein System ähnlich zu denen in 6.1 untersuchen (siehe Abb. 6.4). Brownsche Teilchen bewegen sich in einem dünnen Flüssigkeitsfilm. Dieser ist von periodisch angeordneten dreieckig geformten Hindernissen durchsetzt (siehe Abb. 6.4). Durch ein konstantes elektrisches Feld werden die Teilchen in eine feste Richtung gezogen. Aufgrund der Diffusion weichen die Partikel vom geradlinigen Weg ab. Dabei ist die Abweichung der kleineren Teilchen (wegen einer größeren Diffsionskonstanten) von der durch das Feld vorgegebenen Richtung im Mittel größer als die Abweichung der größeren. Mit denselben Argumenten wie in 6.1 erwarten wir aufgrund der Gestalt der Hindernisse einen Fluß der Teilchen nach rechts. Dieser Fluß fällt um so größer aus, je größer die Diffusionskonstante der Teilchen ist. Deshalb kann man dieses System, ähnlich wie die in Abschnitt 6.1 besprochenen Systeme, zur Teilchenseparation benutzen. Solche Systeme wurden vor kurzem experimentell verwirklicht [104].

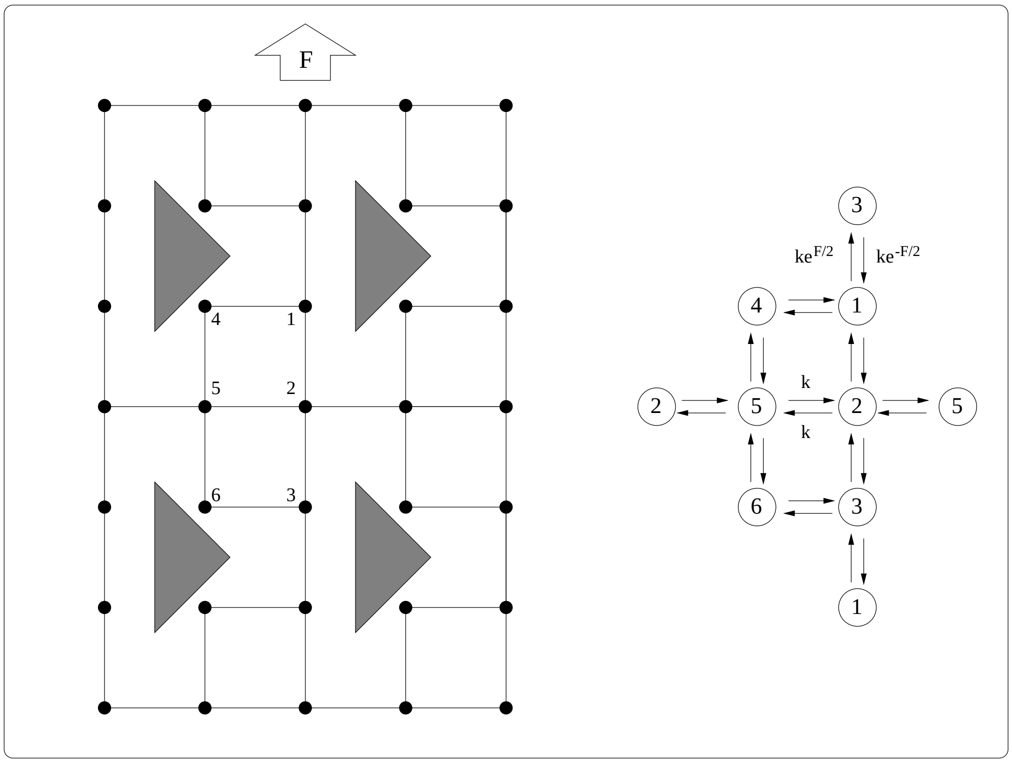

Abbildung 6.4: Links: Hindernisse in einem Flüssigkeitsfilm in dem sich Brownsche Teilchen bewegen. Die Teilchen werden sich nicht nur in Richtung der Kraft, sondern wegen der Brownschen Bewegung und der Gestalt der Hindernisse auch nach rechts bewegen. Rechts: Das entsprechende Markov-Modell, das das Verhalten der Brownschen Teilchen in dem System beschreibt.

Auf der linken Seite von Abb. 6.4 ist ein doppelt periodisches Gitter mit 6 Zuständen abgebildet. Auf diesem kann die Dynamik des Teilchens in dem Hindernisparcours simuliert werden. Die Bewegung des Brownschen Teilchens wird auf dem Gitter durch einen Markov-Übergang von einem Zustand in einen anderen modelliert. Zunächst

ist offensichtlich, daß alle horizontalen Übergangsraten denselben Wert k haben. Aus Symmetriegründen wird der Effekt der vertikalen Kraft F auf das Markov-Modell übertragen, indem sie auf den Abwärtsübergang und den Aufwärtsübergang zu gleichen Teilen aufgeteilt wird. Also sind die Übergangsraten in Richtung der Kraft durch $k\exp(F/2)$ und in entgegengesetzter Richtung durch $k\exp(-F/2)$ gegeben.
Im stationären Fall hat jede Konfiguration i eine Wahrscheinlichkeit P_i. Diese Wahrscheinlichkeit bleibt unverändert und wir erhalten deshalb die zeitunabhängige Mastergleichung

$$\sum_j (k_{ji}P_j - k_{ij}P_i) = 0. \tag{6.7}$$

Hierbei sind die k_{ji} die Übergangsraten vom Zustand j in den Zustand i und k_{ij} die Übergangsraten vom Zustand i in den Zustand j. Wegen der Normierungsbedingung ($\sum_{i=1}^{6} P_i = 1$) ist die Dynamik des Systems durch die Gleichungen (6.7) für 5 Zustände vollständig bestimmt. Der Fluß in horizontaler Richtung läßt sich am einfachsten durch $k(P_2 - P_5)$ ausdrücken. Man kann den Fluß auch in Abhängigkeit von F angeben und erhält $J(F) = 1/7k\tanh^2(F/4)$. Das ist eine gerade Funktion, die sich in der Nähe von $F = 0$ quadratisch verhält.
Im nächsten Abschnitt machen wir einen fundamentaleren Ansatz zur Behandlung eines ähnlichen Problems. Wir untersuchen die Diffusion von Teilchen in einem zweidimensionalen kontinuierlichen Potential, dessen Gestalt dem Hindernisparcours aus Abb. 6.4 ähnelt.

6.3 Modell einer zweidimensionalen Ratsche

Wir betrachten jetzt ein konkretes kontinuierliches System. Die Beschreibung dieses Systems erfolgt durch stochastische Differentialgleichungen und alternativ durch eine Fokker–Planck Gleichung.

6.3.1 Ein System stochastischer Differentialgleichungen

Wir betrachten ein Brownsches Teilchen, das sich in der $(\hat{x}, \hat{y})$-Ebene bewegt. Die Dächer stehen für unskalierte Variablen. In der Ebene werden Hindernisse periodisch angeordnet (siehe z.B. Abb. 6.4). Die Hindernisse werden durch ein kontinuierliches, periodisches Potential $\hat{V}_0(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{V}_0(\hat{x} + L_x, \hat{y}) = \hat{V}_0(\hat{x}, \hat{y} + L_y)$ beschrieben. Die Reflexionssymmetrie des Potentials in $\hat{x}$-Richtung sei gebrochen und in $\hat{y}$-Richtung vorhanden.
Zusätzlich soll eine konstante Kraft in $\hat{y}$-Richtung auf das Teilchen wirken um das System aus dem Gleichgewicht zu treiben. Damit ist das totale Kraftfeld durch das Potential $\hat{V}(\hat{x}, \hat{y}) = \hat{V}_0(\hat{x}, \hat{y}) - \hat{F}\hat{y}$ bestimmt.
Betrachten wir das System im überdämpften Fall, so ergeben sich folgende stochastische Bewegungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
\gamma\frac{d\hat{x}}{d\hat{t}} &= -\frac{\partial\hat{V}(\hat{x},\hat{y})}{\partial\hat{x}} + \sqrt{2\gamma kT}\hat{\xi}_x(\hat{t}) \quad , \\
\gamma\frac{d\hat{y}}{d\hat{t}} &= -\frac{\partial\hat{V}(\hat{x},\hat{y})}{\partial\hat{x}} + \sqrt{2\gamma kT}\hat{\xi}_y(\hat{t}) \quad ,
\end{aligned} \tag{6.8}
$$

wobei $\hat{\xi}_x$ und $\hat{\xi}_y$ voneinander unabhängiges gaußsches weißes Rauschen mit verschwindendem Mittelwert und der Korrelationsfunktion $\langle\hat{\xi}_i(\hat{t})\hat{\xi}_i(\hat{t}')\rangle = \delta(\hat{t}-\hat{t}')$, $i = x, y$ darstellen.
Wir wollen nun die Gleichungen (6.8) in eine dimensionslose Form bringen. Der genaue Weg wird im Anhang beschrieben. Wir arbeiten mit den folgenden skalierten Variablen

$$
\begin{aligned}
t &= \hat{t}/\tau_0 \quad , & (6.9)\\
x &= \hat{x}/L_x \quad , & (6.10)\\
y &= \hat{y}/L_y \quad , & (6.11)\\
V(x,y) &= \hat{V}(\hat{x},\hat{y})/\triangle\hat{V}. & (6.12)
\end{aligned}
$$

Hierbei sind L_x und L_y die Perioden des Systems in $x-$ und in y–Richtung. $\triangle\hat{V}$ ist die maximale Ausdehnung des Potentials und τ_0 ist eine charakteristische Zeit in dem System. Hier soll τ_0 die Zeit sein, die daß überdämpfte Teilchen im deterministischen Fall benötigt, um unter dem Einfluß der Kraft $\triangle\hat{V}/L_x$ den Weg L_x zurückzulegen:

$$
\tau_0 = \frac{\gamma L_x^2}{\triangle\hat{V}}. \tag{6.13}
$$

Aus (6.8) erhält man folgende dimensionslose Bewegungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + \sqrt{2D}\xi_x(t) \quad , x\in[0,1] \\
\frac{dy}{dt} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + \sqrt{2D}\xi_y(t) \quad , y\in[0,L]
\end{aligned} \tag{6.14}
$$

wobei der dimensionslose Diffusionskoeffizient sich zu $D = k_BT/\triangle\hat{V}$ ergibt und $L = L_y/L_x$ das Verhältnis der beiden Perioden angibt. ξ_x und ξ_y sind wieder unkorreliertes weißes gaußsches Rauschen von der Intensität 1.
Nun bleibt nur noch die Aufgabe ein geeignetes Potential festzulegen. Da das Potential symmetrisch angeordnete Hindernisse beschreiben soll wählen wir:

$$
V(x,y) = V_0(x,y) - Fy = [1 - A\sin(2\pi y/L)]U(x) - Fy. \tag{6.15}
$$

Das eindimensionale Potential $U(x)$ (siehe Abb. 2.4) ist dabei ein Sägezahnpotential der Höhe eins mit einem Parameter $k \in (0,1)$, der die Asymmetrie des Potentials bestimmt. Für $k = 0.5$ ist das Potential symmetrisch. In y-Richtung wird $U(x)$ periodisch mit einer Amplitude A moduliert. Der lineare Term steht für die konstante Steigung, welche das System aus dem Gleichgewicht treibt. Die Gestalt dieses Potentials wird aus Abb. 6.5 und aus Abb. 6.6 ersichtlich.

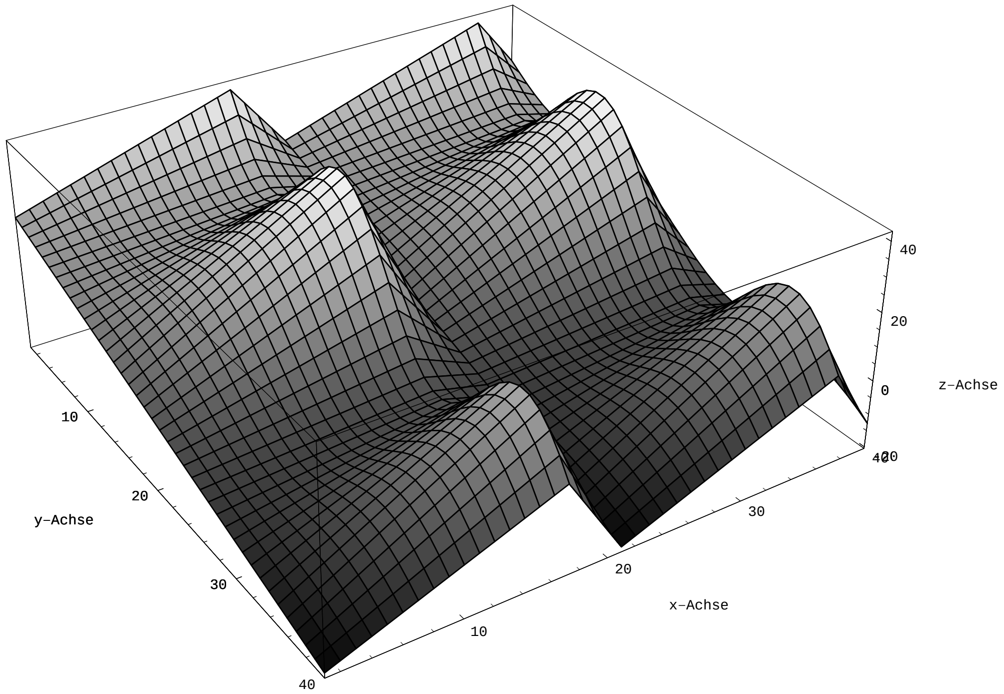

Abbildung 6.5: Das zweidimensionale Potential (6.15) für $F = 1.0$. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$, $k = 0.8$ und $L = 1.0$.

6.3.2 Zweidimensionale Smoluchowskigleichung

Die zweidimensionale Smoluchowskigleichung zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, y, t)$ kann nun direkt in dimensionslosen Variablen formuliert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x}(f_x(x,y)P(x,y)) - \frac{\partial}{\partial y}(f_y(x,y)P(x,y)) \\ &+ D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,y) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}P(x,y). \end{aligned} \tag{6.16}$$

Hierbei sind f_x und f_y die Komponenten der dimensionslosen Kraft, die durch den negativen Gradienten von $V(x, y)$ bestimmt ist.
Die Smoluchowskigleichung (6.16) mit dem Potential (6.15) bleibt unter folgenden Transformationen unverändert:

$$(x, y) \to (x + 1, y) \quad , \quad (x, y) \to (x, y + L). \tag{6.17}$$

Wählt man periodische Anfangsbedingungen $P(x, y, t = 0)$ (also ein P das invariant unter den Transformationen (6.17) ist)

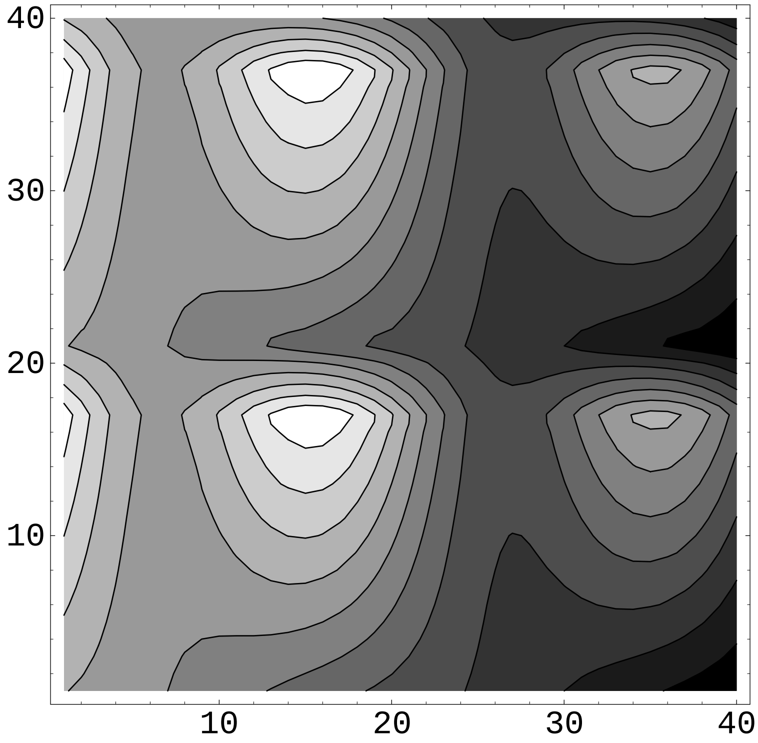

Abbildung 6.6: Höhenlinien des Potentials aus Abb. 6.5. Dunkle Bereiche stehen für niedrige, helle Bereiche entsprechend für hohe Potentialwerte.

$$P(x,y,0) = P(x+1,y,0) \quad , \quad P(x,y,0) = P(x,y+L,0) \quad , \tag{6.18}$$

und normiert man diese über ein Rechteck

$$\int_0^1 \int_0^L P(x,y,0) dx dy = 1 \quad , \tag{6.19}$$

dann wird auch die Lösung $P(x,y,t)$ periodisch und normiert sein, und zwar für beliebige Zeiten t. Insbesondere ist auch der stationäre Zustand

$$P^0(x,y) = \lim_{t \to \infty} P(x,y,t) \tag{6.20}$$

periodisch und normiert.
Wegen der oben aufgezeigten Symmetrien des Systems beschränken wir uns nun bei der Betrachtung der Smoluchowskigleichung auf den Bereich $[0,1] \times [0,L]$ mit den Randbedingungen

$$P(x,y,t) = P(x+1,y,t) \quad , \quad P(x,y,t) = P(x,y+L,t) \quad . \tag{6.21}$$

Die stationäre Lösung $P^0(x,y)$ der Gleichung (6.16) ist von besonderem Interesse, da wir an dem Langzeitverhalten des stationären Flusses interessiert sind. $P^0(x,y)$ enthält alle relevanten Informationen zur Berechnung des stationären Flusses in dem System. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} J_x(x,y) &= f_x(x,y)P^0(x,y) - D_x\frac{\partial}{\partial x}P^0(x,y), \\ J_y(x,y) &= f_y(x,y)P^0(x,y) - D_y\frac{\partial}{\partial y}P^0(x,y). \end{aligned} \tag{6.22}$$

Der totale Transport über eine Periode in $x-$Richtung kann bestimmt werden, indem man zunächst die mittlere Geschwindigkeit $\langle v_x \rangle$ berechnet. Mittels der Normierungsbedingung (6.19) wird die mittlere Geschwindigkeit durch den totalen Fluß bestimmt:

$$\langle v_x \rangle = J_x^{tot} = \int_0^1 \int_0^L J_x(x,y)dxdy. \tag{6.23}$$

Benutzt man dann noch (6.22), erhält man

$$\langle v_x \rangle = \int_0^1 \int_0^L f_x(x,y)P^0(x,y)dxdy, \tag{6.24}$$

weil der zweite Term in (6.22) nicht zum totalen Fluß beiträgt.

6.4 Numerische Analyse des Modells

Die numerische Analyse des Modells erfolgt nach zwei wesentlichen Gesichtspunkten.
Es soll konkret gezeigt werden, daß das zweidimensionale Modell im Vergleich mit der entsprechenden eindimensionalen *flashing ratchet* ein wesentlich komplexeres Verhalten aufweist. Insbesondere ist der Effekt der Stromumkehr allein im zweidimensionalen Modell zu beobachten.
Desweiteren soll gezeigt, daß sich zu einem gegebenen Separationsproblem (d.h. bei Kenntnis der Größe und Eigenschaft der Teilchen) die Temperatur, die Stärke der treibenden Kraft und die Gestalt der Hindernisse so wählen lassen, daß der Trennungsmechanismus maximal effizient wird.

6.4.1 Abhängigkeit des Flusses von der treibenden Kraft

Wenn die Kraft F verschwindet, ist das Potential $V(x,y)$ periodisch. Die Smoluchowskigleichung (6.16) wird in diesem Fall durch die Boltzmann-Verteilung $P^0(x,y) \cong e^{-V(x,y)/D}$ gelöst. Offensichtlich verschwinden dann auch die lokalen Flüsse, $J_x(x,y) = J_y(x,y) = 0$. Die Einführung der Kraft F in y-Richtung treibt das System aus dem Gleichgewicht. In diesem Fall ist keine analytische Lösung bekannt.

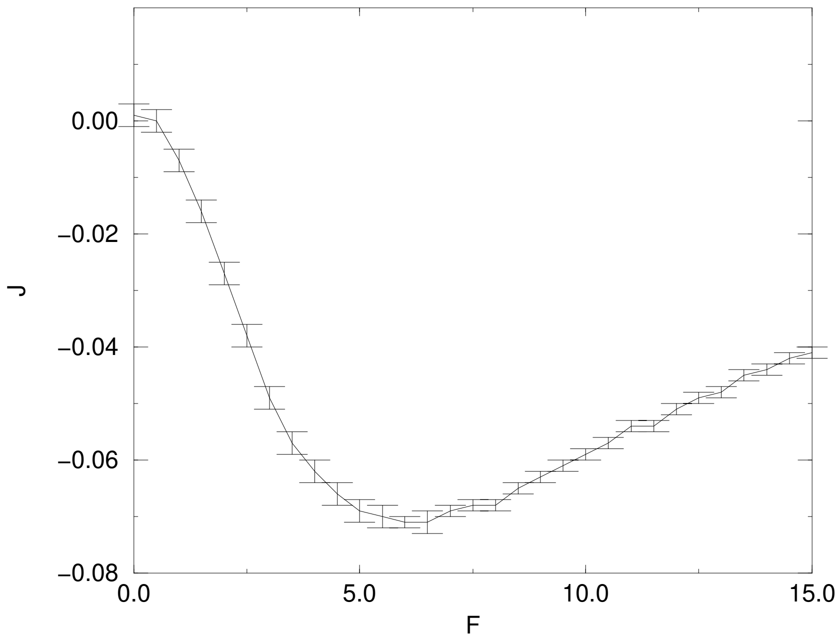

Abbildung 6.7: Der totale Fluß in dem System in x-Richtung in Abhängigkeit von der treibenden Kraft F. Die übrigen Parameter sind $k = 0.8$, $A = 0.8$, $L = 1.0$ und $D = 0.2$.

Eine nichtverschwindende Kraft $F \neq 0$ induziert Flüsse in dem System. Dabei tritt nicht nur der erwartete Fluß in y-Richtung des Systems auf, sondern auch der uns interessierende Fluß in x-Richtung. Für quantitative Analysen berechnen wir zunächst den totalen Fluß

$$J = \int_0^1 \int_0^1 J_x(x,y)dxdy \tag{6.25}$$

in x-Richtung des Systems. Der interessanteste Aspekt des Modells ist die Abhängigkeit des induzierten Flusses [4] J von der treibenden Kraft F. Mit der Wahl der Parameter $A = 0.8$, $D = 0.2$ und $k = 0.8$ wird die Kurve $J(F)$ in den Abbildungen Abb. 6.7 und Abb. 6.8 wiedergegeben. Wegen der Symmetrie des Potentials $V_0(x,y)$ in y-Richtung kann sich der Fluß durch die Ersetzung $F \to -F$ nicht ändern. Entsprechend sieht man in Abb. 6.8 das $J(F)$ eine symmetrische Funktion von F ist.
Wie erwartet verschwindet der Fluß bei $F = 0$. Dort ist das System im detaillierten Gleichgewicht. Mit ansteigendem F tritt ein negativer Fluß auf, der seinen maximalen absoluten Wert bei ungefähr $F \cong 5.5$ erreicht (siehe Abb. Abb. 6.7). Für obige Parameter ist der Schwellenwert für die Kraft F, für die das Potential keine Maxima in y-Richtung mehr hat, $F = 5.0$. Oberhalb dieses Wertes fällt das Potential in y-Richtung monoton ab. Das erklärt die Position des Minimums in Abb.

[4] J steht von nun an für J_x

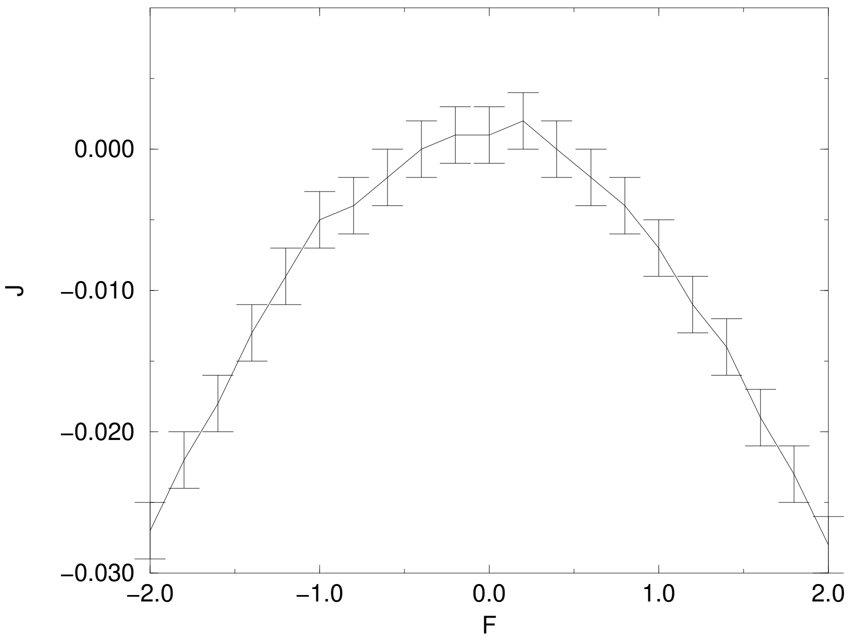

Abbildung 6.8: Der totale Fluß in x-Richtung ist eine symmetrische Funktion von F. Die übrigen Parameter sind identisch mit denen aus Abb. 6.7.

6.7. Übersteigt die Kraft den Wert $F = 5.0$, kann man ein anderes Verhalten des Systems beobachten.
Abbildung Abb. 6.7 zeigt scheinbar für kleine F eine Stromumkehr. Der Fluß ist in diesem Bereich positiv und wird für größere F negativ. Dies ist aber auf numerische Instabilitäten des verwendeten Algorithmus zurückzuführen.

6.4.2 Analyse des vollen Parameterraums

Wir wollen hier quantitative Aussagen über den totalen Fluß in x-Richtung für den vollen Parameterraum treffen. Dazu haben wir die drei Parameter (L, D, F) zu berücksichtigen. Sie repräsentieren drei unterschiedliche Eigenschaften des Systems: L legt die Geometrie der Anordnung fest [5], D kontrolliert die relative Temperatur und F ist ein Maß für die extern treibende Kraft. Weil L die Länge von einer Periode des Systems in y-Richtung festlegt, ist beim Vergleich der Flüsse von Systemen unterschiedlicher Größe Vorsicht geboten. Weil wir ein Hindernis als einen Berg des Potentials $V(x, y)$ identifizieren (bzw. eine Periode), ergibt sich der Fluß $J_x = v_x$ als die mittlere Anzahl von Teilchen, die pro Zeiteinheit den rechten Rand einer Reihe von Hindernissen passieren. Um nun Systeme mit unterschiedlichem L vergleichen zu können, betrachten wir die mittlere Flußdichte. Diese ist einfach das Verhältnis J_x/L und somit der Fluß der Teilchen pro Längeneinheit in y. Dies ist gerade die

[5] L verkleinert oder vergrößert das System; es schrumpft oder streckt das Potential

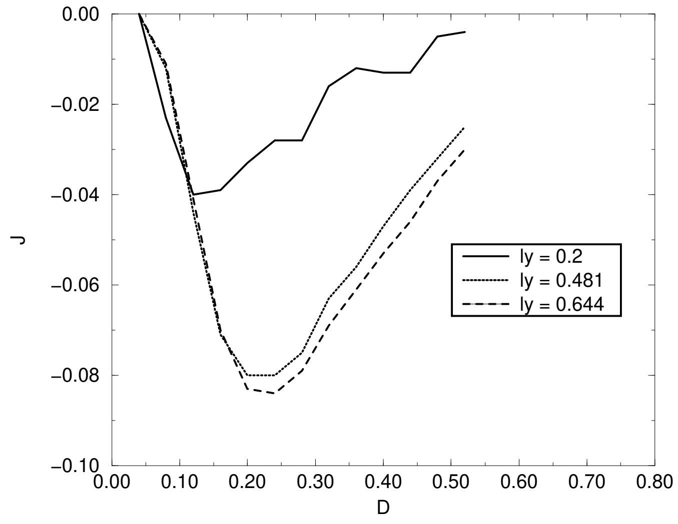

Abbildung 6.9: Die Flußdichte in Abhängigkeit von der Diffusionskonstanten für verschiedene Werte von $l_y = L$. Alle Kurven sind für ein festes $F = 5.5$ berechnet. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$ und $k = 0.8$.

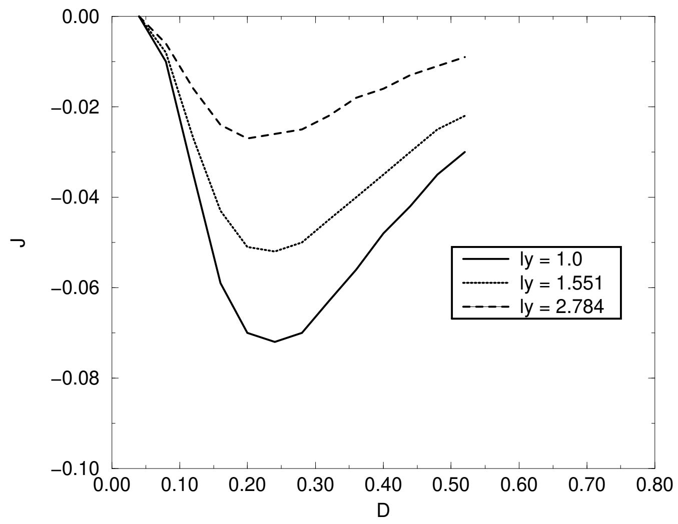

Abbildung 6.10: Die Flußdichte in Abhängigkeit von der Diffusionskonstanten für verschiedene Werte von $l_y = L$. Alle Kurven sind für ein festes $F = 5.5$ berechnet. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$ und $k = 0.8$.

Größe, die für die Konstruktion eines Separationsmechanismus interessant ist.
Wir erwarten, ein globales Extremum für den Fluß in x-Richtung zu finden und zwar bei endlichen Werten der Parameter (L, D, F). Dies wäre entscheidend für

praktische Anwendungen. Mit anderen Worten bedeutet dies nämlich, daß man für ein gegebenes Separationsproblem (bekannte Größe und Eigenschaft der Teilchen) immer die Temperatur, die Stärke der treibenden Kraft und die Gestalt der Hindernisse so wählen kann, daß man maximale Effizienz erreicht.
In Abb. 6.9 und Abb. 6.10 ist die Flußdichte in Abhängigkeit von D für verschiedene Werte von l_y zu erkennen. Hierbei wurde $l_x = 1$ gesetzt, so daß $l_y = L$ gilt. Alle Kurven wurden für ein festes $F = 5.5$ berechnet. Zur besseren Übersicht sind die Kurven auf zwei Diagramme verteilt.
Alle Kurven zeigen gemeinsam die typische Abhängigkeit das Flußes von der Temperatur, wie sie auch im 1D-flashing-ratchet auftritt. Im Abschnitt 6.5 wird begründet, warum das 1D-Analogon zu unserem System ein flashing-ratchet ist. Typisch ist, daß der Fluß (und damit auch die Flußdichte) bei endlichen Werten ein Maximum annimmt. Oberhalb dieses Maximums wird die Temperatur (bzw. die Diffusionskonstante) allmählich so groß, daß das Ratschenpotential kaum noch eine Wirkung auf das Teilchen ausübt. Das System wird von dem Rauschterm dominiert, welcher natürlich völlig ungerichtet ist. Somit verschwindet der Fluß für hohe Temperaturen. Für zu geringe Temperaturen wird der Ratscheneffekt überhaupt nicht wirksam, da das Teilchen in einem Potentialminimum (in einer Hindernisreihe) gefangen bleibt. Es bekommt nicht genügend Energie aus der thermischen Umgebung, um die Potentialbarrieren in x-Richtung zu überwinden.

Vergleicht man die Kurven mit unterschiedlichem $l_y = L$ miteinander, so findet

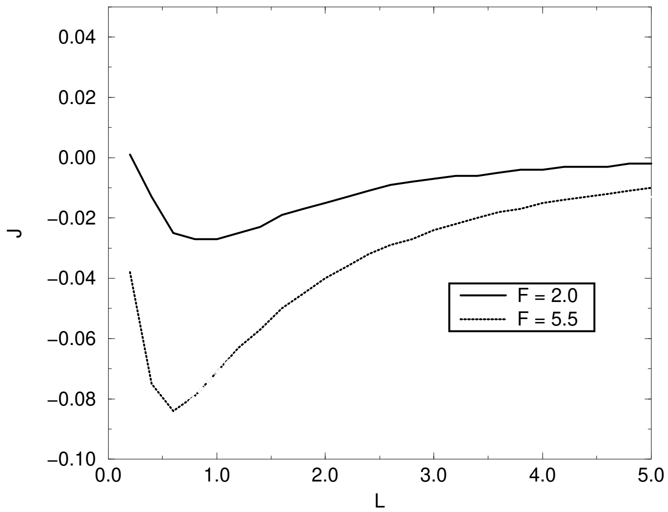

Abbildung 6.11: Die Flußdichte in Abhängigkeit von dem Parameter L für verschiedene Werte von F. Alle Kurven sind für eine feste Temperatur $D = 0.208$ berechnet. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$ und $k = 0.8$.

man, daß der Fluß bei ungefähr $L \cong 0.55$ maximal wird. Für kleinere Werte von L verschiebt sich das Maximum des Flusses nach links und wird kleiner (siehe Abb. 6.9). Für größere Werte von L wird das Maximum des Flusses ebenfalls nach links

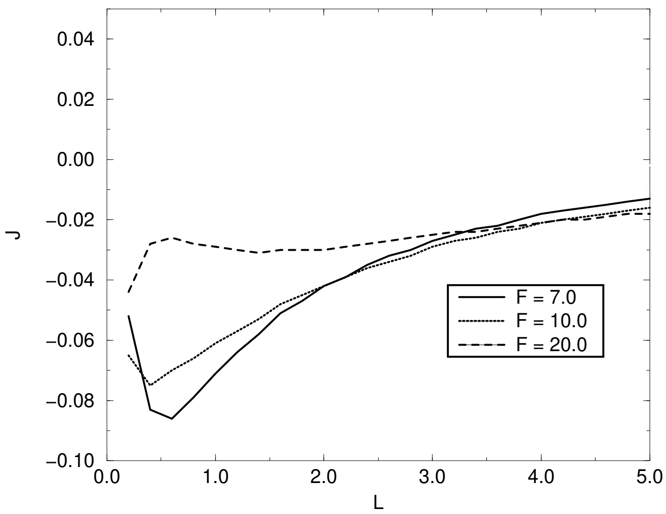

Abbildung 6.12: Die Flußdichte in Abhängigkeit von dem Parameter L für verschiedene Werte von F. Alle Kurven sind für eine feste Temperatur $D = 0.208$ berechnet. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$ und $k = 0.8$.

verschoben und kleiner (siehe Abb. 6.10).
In Abb. 6.11 und Abb. 6.12 ist die Flußdichte in Abhängigkeit von L für verschiedene Werte von F zu erkennen. Hier wird nun die Temperatur des Systems konstant gehalten: $D = 0.208$. Man erkennt zunächst, daß der Fluß in jeder Kurve für einen endlichen Wert von L ein Maximum annimmt (Für die Kurve mit $F = 20.0$ müßte man Flüsse für sehr kleine L berechnen. Dort wird der Simulationsalgorithmus aber numerisch instabil (siehe 5.1)). Der Fluß wird maximal bei etwa $F \cong 5.5$. Für kleinere (siehe Abb. 6.11) wie auch für größere Werte (siehe Abb. 6.12) von F wird das Maximum des Flusses kleiner.
In Abb. 6.13 erkennt man die Abhängigkeit des Flusses von der Asymmetrie des Potentials $U(x)$. Der optimale Wert für den Asymmetrieparameter ist also $k = 1.0$ oder $k = 0.0$. Diese beiden Möglichkeiten sind äquivalent. Das Potential steigt also langsam an, um dann senkrecht auf null abzufallen.

6.4.3 Nichtsymmetrische Diffusionskoeffizienten

Bisher wurden alle Rechnungen für den Fall $D = D_x = D_y$ durchgeführt. In diesem Kapitel betrachten wir das Modell mit unterschiedlichen Diffusionskonstanten in x- und y-Richtung. Wegen des Fluktuations-Dissipations-Theorems ist es nicht möglich, die Diffusionskonstante D_y allein zu ändern. Der einzige Weg D_y zu ändern, ist eine Änderung der Reibungskonstante in y-Richtung. Eine Änderung der Reibungskonstanten entspricht aber einer Reskalierung von einer der Ortskoordinaten des Systems (siehe Anhang D).
Man kann sich aber folgende Situation vorstellen: Das System wird zusätzlich einem

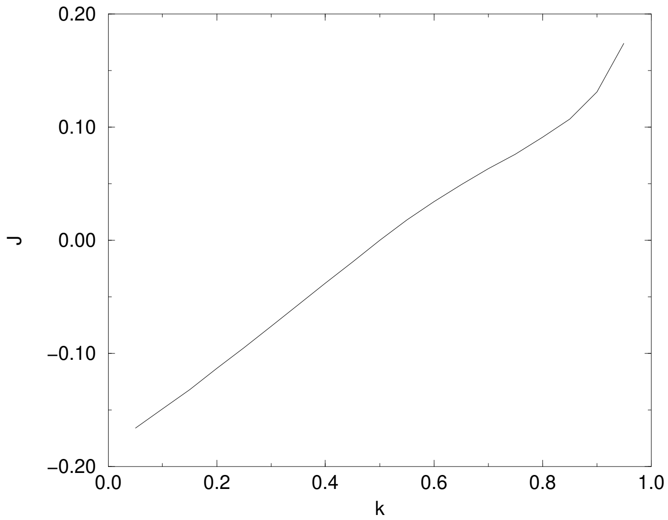

Abbildung 6.13: Die Abhängigkeit des Flusses $J(k)$ von der Asymmetrie des Potentials $U(x)$. Die übrigen Parameter sind $A = 0.8$, $F = 5.5$ und $D = 0.2$.

schnell fluktuierendem elektrischen Feld ausgesetzt. Das elektrische Feld wirkt dabei nur in einer Richtung des Systems. Wenn man voraussetzt, daß die Korrelationszeit des Feldes hinreichend klein ist, wird das Feld eine Änderung der effektiven Diffusionskonstante in die gewählte Richtung bewirken.
Es gibt noch einen anderen Grund, den Fall nichtsymmetrischer Diffusionskonstanten zu betrachten. Das zweidimensionale Ratschensystem scheint sich nämlich für kleine D_y wie das eindimensionale flashing-ratchet zu verhalten. Dies wird in Kapitel 6.5 näher untersucht.

In Abb. 6.14 ist der Fluß in Abhängigkeit von der Diffusionskonstanten in y-Richtung D_y für verschiedene Werte der treibenden Kraft F zu erkennen. Die Diffusionskonstante in x-Richtung wurde auf $D_x = 0.3$ festgesetzt. Man erkennt eindeutig eine Stromumkehr [6] für kleine Kräfte F. Dies wird in Abb. 6.15 noch deutlicher. Dort ist der Fluß gegen die treibende Kraft F für $D_y = 0.01$ aufgetragen. Die Diskussion des Phänomens der Stromumkehr erfolgt im nächsten Kapitel.

6.5 Vergleich mit der Flashing-Ratchet

Das von uns betrachtete Modell einer zweidimensionalen Ratsche kann als eine Erweiterung des Konzepts der eindimensionalen flashing–ratchet verstanden werden. Die Wirkung der konstanten Kraft F in y-Richtung des Sytems ersetzt die periodische zeitabhängige Änderung des Potentials. Ein Teilchen, das sich in y-Richtung (parallel zu der Kraft) bewegt, unterliegt einer ähnlichen periodischen Modulation wie ein Teilchen in einem periodischen 1D-flashing-Potential. Dieser Vergleich wird

[6] Das Teilchen bewegt sich abhängig von F in unterschiedliche Richtungen.

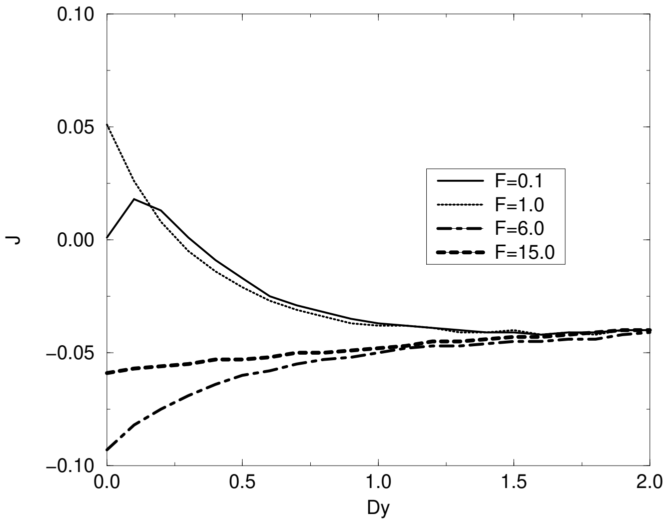

Abbildung 6.14: Die Abhängigkeit des Flusses von der Diffusionskonstanten D_y für kleine und große Kräfte F. Bei kleinen Kräften ist eine Stromumkehr zu erkennen. Die verbleibenden Parameter sind $D_x = 0.3$, $k = 0.8$ und $A = 0.8$.

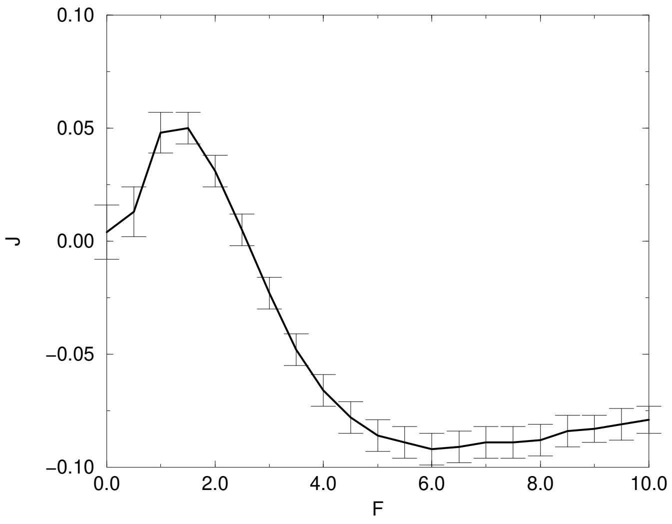

Abbildung 6.15: Die $J(F)$-Charakteristik für $D_y = 0.01$. Die verbleibenden Parameter sind $D_x = 0.3$, $k = 0.8$ und $A = 0.8$.

exakt, wenn das System kein Rauschen in y-Richtung aufweist (Wir unterscheiden hier zwischen D_x und D_y). Außerdem muß die Kraft F hinreichend groß sein, so daß Beiträge der Kraft f_y, die aus dem Potential $V_0(x, y)$ stammen, vernachlässigt werden können. In dieser Approximation kann die zweite Langevingleichung (8.20)

durch $\dot{y} = F$ ersetzt werden.
Hier werden drei Situationen verglichen, nämlich das 1D-flashing-Ratchet, die 2D-Ratsche mit isotroper Diffusion ($D_x = D_y$) und die 2D-Ratsche mit anisotroper Diffusion ($D_x \gg D_y = 0.01$). Das Ergebnis ist in Abb. 6.16 zu sehen. Dort erkennt man zunächst, daß sich alle drei Ratschen oberhalb eines bestimmten Wertes der treibenden Kraft ($F \cong 5$) ähnlich verhalten. Dies kann man dadurch erklären, daß die Teilchen in den beiden 2D-Ratschen sich mit konstanter mittlerer Geschwindigkeit in y-Richtung bewegen (wenn F von der Größenordnung 10 ist, dann sind $D_y = 0.3$ und $D_y = 0.01$ vernachlässigbar) und sich damit in der Situation der periodischen flashing-ratchet in x-Richtung befinden.
Für kleine F verhalten sich die 2D-Ratschen ganz anders als die flashing-ratchet. Die 2D-Ratsche mit isotroper Diffusion erzeugt im Vergleich mit dem flashing-ratchet einen für alle F kleineren Fluß. Die Bewegung des Teilchens in y-Richtung ist nämlich durch die Kraft f_y, die aus dem Potential V_0 stammt, gestört. Die Bewegung in y-Richtung wird durch hohe Potentialwerte behindert und die Teilchen können sich nur durch thermische Anregung vorwärts bewegen.
Im anisotropen Fall ist das Verhalten des Systems noch komplexer. Für kleine treibende Kräfte F taucht ein unerwartetes Phänomen auf. Der totale Fluß wird positiv. Dieser Effekt unterscheidet sich qualitativ von dem Verhalten der 1D-flashing-Ratsche. Die lokalen Flüsse induzieren in diesem Fall eine komplizierte Dynamik des Brownschen Teilchens. Um *lokale* Flüsse zu berechnen braucht man allerdings einen wesentlichen schnelleren Algorithmus [7]. Auch ohne einen solchen Algorithmus liegt die Vermutung nahe, daß die Stromumkehr, also der Wechsel von positiven zu negativen Flüssen, begleitet wird von dem Erscheinen zirkulierenden Flußes (speziell vom Aufreten von Kreisströmen), also lokalen Flüssen, die nicht zum totalen (globalen) Fluß beitragen. Das solche Kreisströme tatsächlich auftreten können, haben z.B. Ghosh und Khare in [72] analytisch gezeigt.

[7]Er basiert auf der numerische Lösung der Smoluchowskigleichung mit Finite–Elemente–Methoden (siehe 5.2).

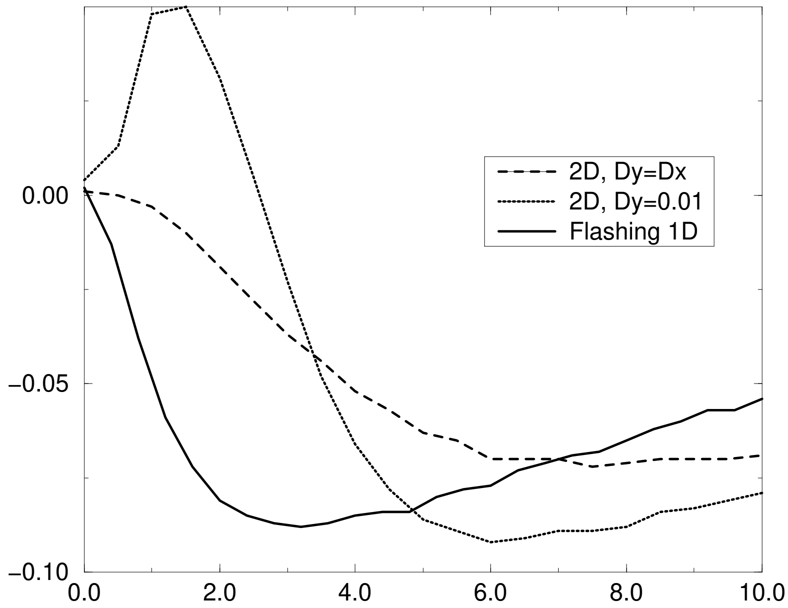

Abbildung 6.16: Der Vergleich der 1D-flashing-Ratsche mit der zweidimensionalen geometrischen Ratsche mit symmetrischen und nichtsymmetrischen Diffusionskoeffizienten. Die verbleibenden Parameter sind $D_x = 0.3$, $k = 0.8$ und $A = 0.8$. Für $F > 5$ verhalten sich die drei Kurven ähnlich. Für kleine treibende Kräfte ist die Diskrepanz erheblich.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegender Arbeit wurden Ratschensysteme in einer und in zwei Dimensionen untersucht. Die drei Hauptbestandteile der Arbeit sollen hier noch einmal zusammenfassend dargestellt werden.

Die besondere Eigenschaft von Ratschensystemen besteht darin, daß in ihnen eine gerichtete Bewegung stattfindet, obwohl im Zeitmittel keine Nettokraft oder gar ein makroskopischer Gradient auf das System wirkt. Anhand von Feynmans „Ratchet and Pawl"–Anordnung wird deutlich, daß im thermischen Gleichgewicht keine gerichtete Bewegung möglich ist. Diese wird erst durch das Auftreten zeitlich korrelierter externer Fluktuationen bei räumlicher Asymmetrie des Systems hervorgerufen. Thermische Ratschen sind somit Beispiele für Systeme, in denen Rauschen ordnend wirken kann.
Zunächst war es notwendig, einen Überblick über bisherige Arbeiten zum Ratscheneffekt zu geben, denn trotz des regen wissenschaftlichen Interesses im letzten Jahrzehnt, das in einer entsprechenden Anzahl von Veröffentlichungen zum Ausdruck kam, wurden keine Versuche unternommen dieses Thema systematisch oder überblickartig aufzuarbeiten [1].

Ein wichtiger Teil der Arbeit bestand in der Erweiterung eines bestehenden *diskreten* Modells zur Beschreibung einer eindimensionalen *flashing ratchet* auf zwei Dimensionen. Während das eindimensionale Modell zu den wenigen bekannten Modellen gehört, bei dem sich der Strom in Abhängigkeit von den Modellparametern analytisch berechnen läßt, trifft dies auf das erweiterte Modell nicht mehr zu. Eine genauere numerische Untersuchung der Eigenschaften des zweidimensionalen Modells wurde durch eine hohe Anzahl an Parametern und durch den modellspezifischen Sättigungeffekt, der als Konsequenz der Diskretisierung des Ortes auftritt, erschwert. Auch eine relativ leichte Implementierung des Modells mittels eines „gewöhnlichen" Zellularautomaten konnte diese Probleme nicht aufheben.

Die Erfahrung mit den diskreten Modellen führte dazu, daß wir uns der Untersuchung der in der bisherigen Forschung kaum behandelten *kontinuierlichen* zweidimensionalen Systeme zuwandten und diese zum zentralen Thema der Arbeit mach-

[1] Erst im letzten Monat erschien ein erster hervorragender Übersichtsartikel von Reimann [46].

ten.
Ein Vorteil des kontinuierlichen Modells im Vergleich zu dem diskreten ist ein relativ kleiner Satz von Modellparametern, deren physikalische Bedeutung unmittelbar klar ist. Der Algorithmus zur Beschreibung der Systemdynamik ist zwar relativ kompliziert und rechenzeitintensiv, erlaubt aber eine systematische Untersuchung des Stroms in Abhängigkeit von den Parametern.
Wir haben ein kontinuierliches zweidimensionales Ratschenmodell zur Separation von Teilchen weiterentwickelt und modifiziert. Die Wahl dieses Modells und insbesondere die Festlegung des Ratschenpotentials wird durch einige bestehende Modellansätze zur Teilchenseparation ausführlich motiviert.
Die numerische Analyse des Modells lieferte zwei wesentliche Ergebnisse:

- Es konnte konkret gezeigt werden, daß das zweidimensionale Modell im Vergleich mit der entsprechenden eindimensionalen *flashing ratchet* ein wesentlich komplexeres Verhalten aufweist. Insbesondere ist der Effekt der Stromumkehr allein im zweidimensionalen Modell zu beobachten.
  Wir vermuten, daß dieser Effekt durch das Auftreten von geschlossenen Strömen, die nicht zum globalen Strom beitragen, verursacht wird. Der von uns entwickelte Algorithmus erwies sich jedoch als zu rechenzeitintensiv, um diese Vermutung numerisch zu belegen.
  Es scheint, daß ein erst kürzlich entwickelter Algorithmus, der in akzeptabler Rechenzeit lokale Flüsse berechnen kann, auf unser Problem anwendbar und damit geeignet ist, unsere Vermutung zu bestätigen[2].

- Desweiteren konnten wir zeigen, daß sich zu einem gegebenen Separationsproblem (d.h. bei Kenntnis der Größe und Eigenschaft der Teilchen) die Temperatur, die Stärke der treibenden Kraft und die Gestalt der Hindernisse so wählen lassen, daß der Trennungsmechanismus maximal effizient wird.

Im Hinblick auf zukünftige Arbeiten auf diesem Gebiet sollen an dieser Stelle noch denkbare Modifikationen und Erweiterungen des kontinuierlichen Modells diskutiert werden.

Alternativen zu dem von uns vorgestellten Modell ergeben sich z.B. aus der Tatsache, daß man bei der Wahl des Ratschenpotentials kaum eingeschränkt ist. Das von uns benutzte Potential ist dadurch ausgezeichnet, daß es in der einen Koordinatenrichtung asymmetrisch, in der anderen jedoch symmetrisch ist (für $F = 0$).
Interessant wäre es sicherlich, den Ratscheneffekt für ein in beiden Richtungen asymmetrisches Potential zu untersuchen. Ein solches System wurde von Ghosh und Khare in [72] bereits theoretisch betrachtet. Sie benutzten das Potential $U(x, y) = U_0(\sin x \sin y - a \sin 2x \sin 2y)$ und konnten zeigen, daß die Teilchen sich unter bestimmten Bedingungen auf Kreisbahnen bzw. auf geschlossenen Bahnen bewegen. Durch Anwendung unseres Algorithmus auf dieses Potential konnten wir hierzu bereits einige numerische Berechnungen anstellen. Der Unterschied des Modells von Ghosh und Khare zu unserem besteht darin, daß es durch zeitliche Fluktuationen des Potentials (analog zu denen der eindimensionalen flashing-ratchet)

[2] Leider konnten wir aus Zeitgründen diesen Algorithmus nicht mehr implementieren.

aus dem Gleichgewicht getrieben wird. Dieser Mechanismus führt zu einer langsameren Relaxation des Systems in den stationären Zustand und damit zu längeren Simulationszeiten.
Im Hinblick auf die im II. Physikalischen Institut der Universität zu Köln angestellten experimentellen Untersuchungen zum Ratscheneffekt in dc SQUIDs [7, 8, 9] scheint uns ein Potential der Form: $U(x,y) = V(x) + \mu(x)y^2$ interessant zu sein. Hierbei sind sowohl $V(x)$ als auch $\mu(x)$ Sägezahnpotentiale mit derselben Periode L. Dieses Potential ist, wie das von uns untersuchte, asymmetrisch in x-Richtung und symmetrisch in y-Richtung. Für einen beliebigen festen Wert y, verläuft es parabelförmig. Bewegt sich ein Teilchen entlang der y-Achse, so wird diese Parabel, abhängig von der „Frequenzfunktion“$\mu(x) > 0$, periodisch schmaller und breiter. Es wäre interessant, den Strom in x-Richtung in Abhängigkeit von der Frequenzfunktion zu untersuchen. Insbesondere läßt sich dieses System vermutlich über die Einführung eines effektiven Potentials durch ein eindimensionales Modell beschreiben. Zu diesem Modell wurden von uns bereits ansatzweise numerische Untersuchungen durchgeführt.

Eine andere Modifikation unseres Modells könnte durch eine Kopplung der stochastischen Differentialgleichungen über die Rauschterme, statt über das Potential, erfolgen. Hierzu ist lediglich die Korrelationsfunktion für das entkoppelte Rauschen $\langle \xi_x(t)\xi_y(t') \rangle = 2k_B T \delta_{xy} \delta(t-t')$ durch $\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2k_B T \gamma_{ij} \delta(t-t')$, zu ersetzen, wobei die Kopplung durch die Korrelationsmatrix

$$\Gamma = (\gamma_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & \epsilon \\ \delta & 1 \end{pmatrix}$$

beschrieben wird.

Desweiteren ist der von uns entwickelte Algorithmus nicht nur auf zweidimensionale Ratschensysteme anwendbar. In der Struktur ähnliche stochastische Differentialgleichungen erhält man, durch die Betrachtung *zweier* Teilchen in einer Dimension. Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen ist durch ein Potential $U(x_1, x_2)$ bestimmt, wobei x_1 und x_2 die Koordinaten der beiden Teilchen angeben. In diesem Sinne wurde bereits das Verhalten zweier durch eine Feder gekoppelter Teilchen in einem Ratschen–Potential untersucht (siehe [45]). Alternativ wäre es interessant, ein System zu untersuchen, bei dem die notwendige räumliche Asymmetrie nicht durch ein externes Ratschenpotential eingebracht wird, sondern dessen interne Wechselwirkungspotential $U(x_1, x_2)$ selbst bereits asymmetrisch ist.

In unserem Modell wurde ausschließlich der überdämpfte Grenzfall behandelt. Berücksichtigt man die Trägheit des Teilchens, so erhält man zwei stochastische Differentialgleichungen zweiter Ordnung, oder entsprechend vier Gleichungen erster Ordnung. Eine Erweiterung unseres Algorithmus auf diesen Fall ist problemlos möglich. Solche Systeme zeichnen sich aber leider durch chaotisches Verhalten aus (siehe [?]). Der Teilchenstrom im stationären Zustand ist dann nicht mehr unabhängig von den Anfangsbedingungen. Dies wird sich bei der Simulation in entsprechend höheren

Rechenzeiten niederschlagen.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß die Untersuchung von insbesondere zweidimensionalen Ratschensystemen gerade erst am Anfang steht und weiterhin ein großer Bedarf an Modellbildung und Lösungsmethoden besteht.

Kapitel 8

Anhang

A Dimensionslose Variablen: Der allgemeine Fall

Es ist üblich, mit dimensionslosen Variablen zu arbeiten, weil vom physikalischen Standpunkt aus nur Verhältnisse zwischen Länge, Zeit und Energie eine Rolle spielen, nicht aber ihre absoluten Werte. Um dimensionslose Variablen einzuführen, ist es gebräuchlich die Langevin-Beschreibung (3.21) zu benutzen:

$$m\ddot{\hat{x}} + \gamma\dot{\hat{x}} = -\frac{d\hat{V}(\hat{x})}{d\hat{x}} + \hat{\Gamma}(\hat{t}) + \hat{\xi}(\hat{t}) \tag{8.1}$$

Die Dächer stehen für unskalierte Variablen. Der zusätzliche Term $\hat{\Gamma}(\hat{t})$ auf der rechten Seite von (8.1) beschreibt korreliertes Rauschen mit einer Korrelationszeit $\hat{\tau}$. $\xi(t)$ ist das übliche unkorrelierte thermische Rauschen. Das räumlich periodische Potential $\hat{V}(\hat{x})$ hat eine Barriere der Höhe $\triangle\hat{V} = \hat{V}_{max} - \hat{V}_{min}$.
Eine charakteristische Länge des Systems ist in natürlicher Weise durch die Periode L des Potentials gegeben. Dementsprechend skalieren wir die Position des Brownschen Teilchens wie $x = \hat{x}/L$.
Die Zeit kann auf unterschiedliche Weisen skaliert werden. Eine erste relevante Zeitskala erhalten wir, indem wir die rechte Seite von (8.1) gleich Null setzen. Dann folgt

$$m\dot{\hat{v}} + \gamma\hat{v} = 0, \qquad \hat{v} = \frac{d\hat{x}}{d\hat{t}}. \tag{8.2}$$

Als Lösung dieser deterministischen Differentialgleichung ergibt sich

$$\hat{v}(\hat{t}) = \hat{v}(0)\exp\left(-\frac{\hat{t}}{\tau_L}\right), \tag{8.3}$$

wobei wir

$$\tau_L = \frac{m}{\gamma} \tag{8.4}$$

Langevinzeit nennen. Das ist die Relaxationszeit der Geschwindigkeit bzw. die Korrelationszeit der Geschwindigkeit des durch weißes Rauschen getriebenen Brownschen Teilchens.
Eine andere charakteristische Zeitskala τ_0 ergibt sich, indem wir die deterministische überdämpfte Bewegung des Teilchens im Potential $\hat{V}(\hat{x})$

$$\gamma \frac{d\hat{x}}{d\hat{t}} = -\frac{d\hat{V}(\hat{x})}{d\hat{x}} \tag{8.5}$$

betrachten. Damit kann τ_0 durch fogende Gleichung definiert werden

$$\gamma \frac{L}{\tau_0} = \frac{\triangle \hat{V}}{L} \tag{8.6}$$

und ergibt sich zu

$$\tau_0 = \frac{\gamma L^2}{\triangle \hat{V}}. \tag{8.7}$$

In diesem Zeitintervall durchläuft ein Teilchen im überdämpften System unter dem Einfluß der konstanten Kraft $\triangle \hat{V}/L$ die Strecke L.
Durch das farbige Rauschen ist eine dritte Zeitskala, nämlich die Korrelationszeit τ gegeben.
Die Langevinzeit und die Korrelationszeit des treibenden nichtthermischen Rauschens hängen nicht vom System, d.h. nicht vom Potential $\hat{V}(\hat{x})$, ab. Nur τ_0 ist unterschiedlich für unterschiedliche Systeme. Deshalb wird hier die Skalierung $t = \hat{t}/\tau_0$ bevorzugt. In diesem Fall kann (8.1) in die folgende dimensionslose Form transformiert werden:

$$\mu \ddot{x} + \dot{x} = f(x) + \Gamma(t) + \xi(t), \qquad f(x) = -\frac{dV(x)}{dx}. \tag{8.8}$$

Dabei ergibt sich für die dimensionslose Masse

$$\mu = \frac{m}{\gamma \tau_0} = \frac{\tau_L}{\tau_0}. \tag{8.9}$$

Diese bestimmt Trägheitseffekte des Brownschen Teilchens und ist gegeben durch das Verhältnis der beiden charakteristischen Zeiten τ_0 und τ_L. Das skalierte Potential $V(x) = \hat{V}(\hat{x})/\triangle \hat{V} = V(x+1)$ hat eine Periode der Länge eins. Die Höhe der Potentialbarriere ist ebenfalls auf Eins skaliert. Die dimensionslose Intensität D von dem skalierten gaußschen weißen Rauschen $\xi(t)$ ergibt sich zu

$$D = \frac{k_B T}{\triangle \hat{V}}. \tag{8.10}$$

Schließlich ergibt sich für das skalierte nichtthermische Rauschen $\Gamma(t) = (L/\triangle\hat{V})\hat{\xi}(\hat{t})$ und für dessen Korrelationszeit $\tau = \hat{\tau}/\tau_0$.
Wenden wir uns nun der interessantesten Größe, nämlich der mittleren Driftgeschwindigkeit des Teilchens, zu. Diese ergibt sich aus den unskalierten Variablen im überdämpften Fall (siehe Anhang B)

$$\langle v\rangle = \langle d\hat{x}/d\hat{t}\rangle = v_0\langle dx/dt\rangle = v_0\langle f(x)\rangle = v_0\int_0^1 f(x)P(x,t)dx, \tag{8.11}$$

wobei $v_0 = L/\tau_0$ die charakteristische Geschwindigkeit ist. Hier wurde (8.12) und die Tatsache, daß sowohl das thermische als auch das farbige Rauschen im Mittel verschwinden, benutzt.

B Dimensionslose Variablen: Der überdämpfte Fall

Wir wollen uns nun mit der Bewegung in überdämpften Systemen befassen. Es werden zwei Beispiele aufgeführt, die in sehr guter Näherung durch

$$\dot{x} = f(x) + \Gamma(t) + \xi(t), \quad f(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \tag{8.12}$$

beschrieben werden können. Wir zeigen, daß man den Trägheitsterm $\mu\ddot{x}$ aus (8.8) in vielen Systemen vernachlässigen kann.

Jean Perrin benutzte in seinen grundlegenden Experimenten im Jahre 1908 Teilchen mit dem Radius $R = 10^{-7}m$ und der Masse $m = 10^{-17}kg$. Diese bewegen sich in Wasser bei Raumtemperatur. Die Viskosität beträgt dann $\nu = 10^{-3}kg/sm$. Den Reibungskoeffizienten $\gamma = 2 \times 10^{-9}kg/s$ erhält man aus der Stokes-Formel $\gamma = 6\pi\nu R$. Nehmen wir nun noch eine Potentialbarriere der Höhe $\triangle\hat{V} \simeq 5k_BT$, Raumtemperatur $T = 300K$ und eine charakteristische Länge $L = 10^{-5}m$ (um den Faktor 100 größer als der Teilchenradius) an, so folgt für die dimensionslose Masse $\mu = 5 \times 10^{-10} \ll 1$. Trägheitseffekte können hier also völlig vernachlässigt werden und (8.12) kann angewandt werden.

Ein weiteres Beispiel ist der gerichtete Transport von Material [5] im Inneren einer Zelle. Als Transportstrecken innerhalb einer Zelle dienen Mikrotubuli (röhrenförmige Stränge aus periodisch angeordneten einfachen Molekülen), an denen sich Motorproteine (Actin und Kinesin) in beiden Richtungen entlangbewegen. Diese binden ihrerseits kleine Vesikel, die das zu transportierende Material beinhalten. Nimmt man nun an, daß sich die Motorproteine in einem durch die Struktur der Mikrotubuli gegebenen periodischen Potential bewegen und ihre Bewegung nicht durch chemische, thermische oder gar elektrische Gradienten getrieben wird, sondern durch ihre thermische Umgebung, dürfte nach obigen Überlegungen kein Transport stattfinden.
Für den gradientenfreien Fall muß die Erklärung in der Ankopplung an die Umgebung liegen. Es wurde schnell vermutet, daß die von der Umgebung verursachten Fluktuationen nicht weiß sind, sondern farbig, wodurch auch Nicht–Gleichgewichtsprozesse als treibende Kraft in Frage kommen. Dies ist auch insofern klar, als die Zelle natürlich kein abgeschlossenes Gebilde ist, sondern über die Membran regen Austausch mit ihrer Umwelt betreibt und hierbei gerade bestrebt ist einen Nicht-Gleichgewichtszustand aufrechtzuerhalten.
Die Periode des Potentials beträgt hier $L = 8nm$, die Masse von Kinesin ist $m = 6 \times 10^{-22}kg$ und der Radius beträgt $R = 10^{-8}m$. Der Reibungskoeffizient $\gamma = 2 \times 10^{-8}kg/s$ ergibt sich aus dem Stokes-Gesetz mit $\nu = 10^{-1}kg/ms$ (also 100 mal größer als der von Wasser). Außerdem gilt $\triangle\hat{V} = 5k_BT$ und $T = 310K$. Damit ergeben sich für die in Kapitel A eingeführten charakteristischen Zeiten folgende Werte:

$$\tau_L = \frac{m}{\gamma} = 3 \times 10^{-14} s, \tag{8.13}$$

$$\tau_0 = \frac{\gamma L^2}{\triangle \hat{V}} = 6 \times 10^{-5} s, \tag{8.14}$$

$$\tau_D = \frac{L^2}{2 D_E} = 1.6 \times 10^{-4} s. \tag{8.15}$$

Dabei wurde die Diffusionszeit τ_D neu eingeführt, wobei $D_E = k_B T/\gamma = 2 \times 10^{-13} m^2/s$ die Einsteinsche Diffusionskonstante ist. Für dieses System sind also die Zeitskalen τ_D und τ_0 von gleicher Größenordnung. Andererseits ist der maximale Wirkungsgrad einer Brownschen Ratsche erreicht, wenn die Höhe der Potentialbarriere ungefähr 5 mal größer als die Amplitude der Fluktuationen ist. Die Analyse der Zeitskalen erklärt dieses Phänomen, da in diesen Regionen diffusive und konvektive Effekte auf den gleichen Zeitskalen ablaufen.
Für die dimensionslose Masse ergibt sich $\mu = 5 \times 10^{-10} \ll 1$. Damit ist auch dieses System als ein überdämpftes zu betrachten.

C Herleitung der Fokker-Planck Gleichung

Wir leiten hier die Fokker-Planck-Gleichung (3.30) her. Dazu fassen wir die stochastische Dynamik (3.23) als Grenzfall $\Delta t \to 0$ der diskretisierten Dynamik (3.24) auf. Zur Vereinfachung der Schreibweise benutzen wir dimensionslose Variablen mit $k_B = \gamma = 1$. Die ξ_n in (3.24) sind unabhängige gaussverteilte Zufallsvariablen mit $\langle \xi_n \rangle = 0$ und $\langle \xi_n^2 \rangle = 2T/\Delta t$ (siehe 3.25). Dann folgt, daß die bedingte Wahrscheinlichkeit $P(x|y)$ des Teilchens zur Zeit $t = t_n = n\,\Delta t$ von dem Ort $x_n = y$ zu starten, und einen Zeitschritt Δt später den Ort $x_{n+1} = x$ zu erreichen um $x = y - \Delta t\, V'(y)$ mit Varianz $\langle (\Delta t\, \xi_n)^2 \rangle = 2T\Delta t$ gaußsverteilt ist, d.h.

$$P(x|y) = (4\pi T \Delta t)^{-1/2}\ \exp\left\{ -\frac{[x - y + \Delta t\, V'(y)]^2}{4\,T\,\Delta t} \right\} \ . \tag{8.16}$$

Weiterhin ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x, t + \Delta t)$ zur Zeit $t + \Delta t$ mit der zur Zeit t über die sogenannte Chapman-Kolmogorov Gleichung [1, 2]

$$P(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(x|y)\, P(y, t) \ . \tag{8.17}$$

verbunden. Durch Substitution der Integrationsvariablen $z = (x - y)/\sqrt{\Delta t}$ erhalten wir

$$P(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{(4\pi T)^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{[z + \sqrt{\Delta t}\ V'(x - \sqrt{\Delta t}\, z)]^2}{4\,T} \right\}\ P(x - \sqrt{\Delta t}\, z, t) \ . \tag{8.18}$$

Nun können wir die rechte Seite von (8.18) in Potenzen von $\sqrt{\Delta t}$ entwickeln und erhalten durch Ausführung des verbliebenen Gaußintegrals das Resultat

$$P(x, t + \Delta t) = P(x, t) + \Delta t\, \frac{\partial}{\partial x} \{V'(x)\, P(x, t)\} + \Delta t\, T\, \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) + o(\Delta t) \ . \tag{8.19}$$

Insbesondere gibt es keine Beiträge proportional zu $\sqrt{\Delta t}$. Im Grenzfall $\Delta t \to 0$ folgt nun sofort die Fokker-Planck-Gleichung (3.30).

D Dimensionslose Variablen in 2D-Systemen

Zur Einführung dimensionsloser Variablen im zweidimensionalen Fall gehen wir von den folgenden stochastischen Differentialgleichungen aus: [1]

$$\begin{aligned}
\gamma_x \frac{d\hat{x}}{d\hat{t}} &= -\frac{\partial \hat{V}(\hat{x},\hat{y})}{\partial \hat{x}} + \sqrt{2\gamma_x kT}\hat{\xi_x}(\hat{t}) \quad , \\
\gamma_y \frac{d\hat{y}}{d\hat{t}} &= -\frac{\partial \hat{V}(\hat{x},\hat{y})}{\partial \hat{x}} + \sqrt{2\gamma_y kT}\hat{\xi_y}(\hat{t}).
\end{aligned} \tag{8.20}$$

Hierbei ist $\hat{V}(\hat{x},\hat{y})$ der periodische Teil des Potentials (z.B. das Potential (6.15) mit $F = 0$) mit einer Barrierenhöhe V_0. ξ_x und ξ_y sind unabhängiges gaußsches weißes Rauschen der Intensität eins. Dimensionslose Variablen werden wie im eindimensionalen Fall eingeführt. Eine charakteristische Länge l_0 in x-Richtung wird bestimmt durch die Periode des Potentials $l_0 = L_x$; in y-Richtung durch L_y. Die charakteristische Zeit $\tau_0 = \gamma_x L_x^2/V_0$ wird zur Reskalierung der Zeit gewählt, wobei $x = \hat{x}/L_x$ ist, weil die erste Gleichung des Systems (8.20) dieselbe Form wie die untersuchte Gleichung im vorigen Abschnitt (siehe Anhang A) hat. Die zweite Gleichung soll ebenfalls mit demselbem τ_0 und mit $y = \hat{y}/L_y$ skaliert werden. Deshalb führen wir hier das Verhältnis der Reibungskoeffizienten $b = \gamma_y/\gamma_x$ und das Verhältnis der Perioden des Systems $L = L_y/L_x$ ein. Nach einfachen Umformungen ergibt sich aus (8.20) das folgende skalierte System:

$$\begin{aligned}
\dot{x} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + \sqrt{2D}\xi_x(t) \quad , \\
\dot{y} &= -\frac{1}{L^2 b}\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + \sqrt{\frac{2D}{L^2 b}}\xi_y(t).
\end{aligned} \tag{8.21}$$

Man kann das System (8.21) auch in eine symmetrische Form bringen:

$$\begin{aligned}
\dot{x} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial x} + \sqrt{2D}\xi_x(t) \quad , \\
\dot{y} &= -\frac{\partial V(x,y)}{\partial y} + \sqrt{2D}\xi_y(t).
\end{aligned} \tag{8.22}$$

Jetzt liegt y allerdings im Bereich $(0, L\sqrt{b})$, anstatt in $(0,1)$.
Hier soll noch angemerkt werden, daß wegen des Dissipations-Fluktuations Theorems eine Änderung des Reibungskoeffizienten in eine Richtung einer Reskalierung des Systems in derselben Richtung entspricht.

[1] Wir betrachten hier nur den überdämpften Fall.

Literaturverzeichnis

[1] N. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (North Holland, Amsterdam, 1992)

[2] H. Risken, *The Fokker-Planck-Equation*, (Springer-Verlag, New York, 1984)

[3] P. Hänggi, R. Bartussek, *Brownian Rectifiers: How to Convert Brownian Motion into Directed Transport*, in Nonlinear Physics of Complex Systems - Current Status and Future Trends, Springer-Verlag Berlin, 1996

[4] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, (Addison-Wesley, Reading, 1963), Vol. I, Kapitel 46

[5] siehe z.B.: R. D. Vale, F. Oosawa, Adv. Biophys. **26** (1990) 97; N. J. Cordova, G. B. Ermentrout, G. F. Oster, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **89** (1992) 339; S. M. Simon, C. S. Peskin, G, F. Oster, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **89** (1992) 3770 ; C. S. Peskin, G. M. Odell, G. F. Oster, Biophys. J. **65** (1993) 316

[6] J. A. Spudich, *How molecular motors work*, Nature **372** (1994) 515

[7] S. Weiss, D. Koelle, J. Müller, K. Barthel, R. Gross, *Ratchet effect in dc SQUIDs*, Europhys. Lett. **51** (2000) 499

[8] E. Golobin, A. Sterck, D. Koelle, *Josephson vortex in a ratchet potential: Theory*, cond-mat/0008237

[9] S. Weiss, *Ratscheneffekt in supraleitenden Quanteninterferenzdetektoren*, Dissertation, Shaker Verlag, Aachen, 2000

[10] P. Reimann, persönliche Mitteilung

[11] P. Curie, *Sur la symétrie dans les phénomenes physiques, symétrie d'un champ électrique et d'un champ magnétique*, J. Phys. (Paris) 3. Série (théorique et appliqué) t. III (1894) 393.

[12] M. v. Smoluchowski, *Experimentell nachweisbare, der üblichen Thermodynamic wiedersprechende Molekularphänomene*, Physik. Zeitschr. **8** (1912) 1069

[13] J. M. R. Parrando, P. Espanol, *Criticism of Feynman's analysis of the ratchet as an engine*, Am. J. Phys. **64** (1996) 1125

[14] A. Ajdari, J. Prost, *Mouvement induit par un potentiel périodique de basse symétrie: diélectrophorése pulsée*, xx C. R. Acad. Sci. Paris **315** (1992) 1635

[15] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, J. Prost, *Directional motion of brownian particles induced by a periodic asymmetric Potential*, Nature **370** (1994) 446

[16] L. P. Faucheux, L. S. Bourdieu, P. D. Kaplan, A. J. Libchaber, *Optical Thermal Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1504

[17] M. Magnasco, *Forced Thermal Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1477

[18] J. Luczka R. Bartussek, P. Hänggi, *White Noise Induced Transport in Periodic Structures*, Europhys. Lett. **31** (1995) 431

[19] R. Bartussek, P. Hänggi, J. G. Kissner, *Periodically Rocked Thermal Ratchets*, Europhys. Lett. **28** (1994) 459

[20] M. M. Millonas, M. I. Dykman, *Transport and Current Reversal in stochastically driven ratchets*, Phys. Lett. A **185** (1994) 65

[21] R. Bartussek, P. Reimann, P. Hänggi, *Precise Numerics versus Theory for Correlation Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 1166

[22] P. Hänggi, P. Talkner, Michal Borkevec, *Reaction-rate theory: fifty years after Kramers*, Rev. Mod. Phys. **62** (1990) 251

[23] Peter Talkner, Peter Hänggi (Eds.), *New Trends in Kramers Reaction Rate Theory*, (Kluwer Academic Publishers, 1995)

[24] C. R. Doering, W. Horsthemke, J. Riordan, *Nonequilibrium Fluctuation-Induced Transport*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 2984

[25] I. Zapata, R. Bartussek, F. Sols, P. Hänggi, *Voltage rectification by a SQUID ratchet*, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 2292

[26] F. Falo, P. J. Martinez, J. J. Mazo, S. Cilla, *Ratchet potential for fluxons in Josephson-junction arrays*, Europhys. Lett. **45** (1999) 700

[27] R. D. Astumian, M. Bier, *Fluctuation Driven Ratchets: Molecular Motors*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 1766

[28] U. Kahlert, *Numerische Lösungsverfahren für Systeme unter diskretem Rauschen: Die gerichtete Bewegung in asymmetrischen periodischen Potentialen*, Dissertation an der RWTH Aachen (1997)

[29] M. I. Dykman, H. Rabitz, V. N. Smelyanskiy, B. E. Vugmeister, *Resonant Directed Diffusion in Nonadiabatically Driven Systems*, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1178

[30] J. Schnakenberg, *Stochastische Prozesse*, Vorlesung an der RWTH Aachen

[31] `http://physik.rwth-aachen.de/group/thphys/tpd/Werke/Paper.html`

[32] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*, Springer, Berlin, 1983.

[33] C. R. Doering, *Randomly rattled ratchets*, Nuevo Cimento 17D (1995) 685.

[34] M. Borromeo, F. Marchesoni, *Brownian surfers*, Phys. Lett. A **249** (1998) 8457.

[35] M. Bier, R. D. Astumian, *Biasing Brownian motion in different directions in a 3-state fluctuating potential and an application for the separation of small particles*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4277.

[36] Y. M. Blanter, M. Büttiker, *Rectification of fluctuations in an underdamped ratchet*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 4040.

[37] M. Schreier, P. Reimann, P. Hänggi, E. Pollak, *Giant enhancement of diffusion and particle separation in rocked periodic potentials*, Europhys. Lett. **44** (1998) 416.

[38] B. Lindner, L. Schimansky-Geier, P. Reimann, P. Hänggi, M. Nagaoka, *Inertia ratchets: a numerical study versus theory*, Phys. Rev. E **59** (1999) 1417.

[39] P. Jung, J. G. Kissner, P. Hänggi, *Regular and chaotic transport in asymmetric periodic potentials: inertia ratchets*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 3436.

[40] J. L. Mateos, *Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 258.

[41] J. Prost, J.-F. Chauwin, L. Peliti, A. Ajdari, *Asymmetric pumping of particles*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 2652.

[42] B. Lindner, L. Schimansky-Geier, P. Reimann, P. Hänggi, *Mass separation by ratchets*, in: J. B. Kadtke, A. Bulsara (Eds.), Applied Nonlinear Dynamics and Stochastic Systems near the Millennium, AIP Proc. **411** 1997.

[43] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, J. Prost, *Directional motion of Brownian particles induced by a periodic asymmetric potential*, Nature **370** (1994) 446.

[44] I. Derényi, T. Vicsek, *Cooperative transort of Brownian particles*, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 374.

[45] C. Köhler, *'Simulation und Analyse von Bewegungen unter externen stochastischen Prozessen'*, Dissertation an der RWTH Aachen (1998)

[46] P. Reimann, *Brownian motors: noisy transport far from equilibrium*, cond-math/0004061 (2000)

[47] T. Dittrich, P. Hänggi, *Tunneln mit Antrieb*, Phys. Bl. **51**, 956 (1995)

[48] S. Jorda, *Quanten auf der Kippratsche*, Phys. Bl. **53**, 975 (1997)

[49] P. Reimann, M. Grifoni, P. Hänggi, *Quantum ratchets*, Phys. Rev. Lett.**79**, 10 (1997)

[50] P. Hänggi, P. Reimann, *Quantum ratchet reroute electrons*, Physics World **12**, 21 (1999)

[51] H. Linke, W. Sheng, A. Löfgren, H. Xu, P. Omling, P. E. Lindelof, *A quantum ratchet: experiment and theory*, Europhys. Lett. **44** (1998) 341, erratum: Europhys. Lett. **45** (1999) 406

[52] A. I. Larkin, Y. N. Ovchinikov, *Decay of supercurrent in tunnel junctions*, Phys. Rev. B **28** (1983) 6281

[53] V. Ambegaokar, U. Eckern, G. Schön, *Quantum dynamics of tunneling between superconductors*, Phys. Rev. Lett. **48** (1982) 1745

[54] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, *Quantum tunneling in dissipative systems*, Ann. Phys. (New York) 149 (1983) 374, erratum: Ann. Phys. (New York) 153 (1984) 445

[55] F. Jülicher, A. Ajdari, J. Prost, *Modeling molecular motors*, Rev. Mod. Phys. **69** (1997) 1269

[56] R. D. Astumian, M. Bier, *Fluctuation driven ratchets: molecular motors*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 1766

[57] R. D. Astumian, *Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor*, Science **276** (1997) 917

[58] I. Derényi, T. Vicsek, *Realistic models of biological motion*, Physica A **249** (1998) 397

[59] F. Jülicher, *Force and motion generation of molecular motors: a generic description*, in: S. C. Müller, J. Parisi, W. Zimmermann (Eds.), Lecture Notes in Physics: Transport and structure: Their competitive roles in Biophysics and Chemistry, Springer, Berlin, 1999

[60] K. Svoboda, C. F. Schmidt, B. J. Schnapp, S. M. Block, *Direct observation of kinesin stepping by optical trapping interferometry*, Nature **365** (1993) 721

[61] J. T. Finer, R. S. Simmons, J. A. Spudich, *Single myosin molecule mechanics: Piconewton forces and nanometer steps*, Nature **368** (1994) 113

[62] K. Visscher, M. J. Schnitzer, S. M. Block, *Single kinesin molecules studied with a molecular force clamp*, Nature **400** (1999) 184

[63] J. Maddox, *Making models of muscle contraction*, Nature **365** (1993) 203

[64] J. Maddox, *Directed motion from random noise*, Nature **369** (1994) 181

[65] J. Maddox, *More models of muscle contraction*, Nature **368** (1994) 287

[66] S. Leibler, *Moving forward noisily*, Nature **370** (1994) 412

[67] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, F. Müller, *Drift Ratchet: An Alternative Rectification Scheme for Micropumps and Particle Seperation*, Phys. Rev. E **61** (2000) 312

[68] `http://monet.physik.unibas.ch/~elmer/bm`

[69] `http://borisy.bocklabs.wisc.edu/pages/supplemental/mtfr.html`

[70] M. O. Magnasco, G. Stolovitzky, *Feynman's ratchet and pawl*, J. Stat. Phys. **93** (1998) 615

[71] K. Sekimoto, *Kinetic characterization of heat bath and the energetics of thermal ratchet models*, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 1234

[72] A. W. Ghosh, S. V. Khare, *Rotation in an asymmetric multidiomensional periodic potential due to colored noise*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 5243

[73] H. Qian, *Vector field formalism and analysis for a class of thermal ratchets*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 3063

[74] P. Hänggi, P. Reimann, *Quantum ratchet reroute electrons*, Physics World **12** (1999) 21

[75] M. Brooks, *Quantum clockwork*, New Scientist 2222 (2000) 29

[76] G. Cecchi, M. O. Magnasco, *Negative resistance and rectification in Brownian transport*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 1968

[77] G. W. Slater, H. L. Guo, G. I. Nixon, *Bidirectional transport of polyelectrolytes using self-modulating entropic ratchets*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 1170

[78] H. Ambaye, K. W. Kehr, *Toy model for molecular motors*, Physica A **267** (1999) 111

[79] B. Derrida, *Velocity and diffusion constants of a periodic one-dimensional hopping model*, J. Stat. Phys. **31** (1983) 433

[80] L. Schimansky-Geier, M. Kschischo, T. Fricke, *Flux of particles in sawtooth media*, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3335

[81] A. T. A. M. de Waele, R. D. B. Ouboter, *Quantum–Interference Phenomena in Point Contacts Between Two Superconductors*, Physica **41** (1969) 225

[82] B. D. Josephson, *Possible new effects in superconductive tunneling*, Phys. Lett. **1** (1962) 251

[83] B. D. Josephson, *Supercurrents through barriers*, Adv. Phys. **14** (1965) 419

[84] W. C. Stewart, *Current–voltage characteristics of Josephson junctions*, Appl. Phys. Lett. **12** (1968) 277

[85] D. McCumber, *Effect of ac impedance of dc voltage–current characteristics of Josephson junctions*, J. Appl. Phys. **39** (1968) 3113

[86] P. E. Kloeden, E. Platen, *'Numerical Solution of Stochastic Differential Equations'*, Applications of Mathematics, **23** (Springer, Berlin 1992)

[87] T. Palleschi, R. Lipowsky, *Fast and precise algorithm for computer simulation of stochastic differential equation*, Phys. Rev. A **40** (1989) 3381

[88] D. T. Gillespie, *Exact numerical simulation of the Ornstein-Uhlenbeck process and its integral*, Phys. Rev. E **54** (1996) 2084

[89] R. F. Fox, *Second-order algorithm for the numerical integration of colored-noise problems*, Phys. Rev. Lett. **72** (1991) 2649

[90] H. P. Langtangen, *Computational Partial Differential Equations: Numerical Methods and Diffpack Programming*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 2 Springer 1999

[91] O. C. Zienkiewicz, K. Morgan, *Finite Elements and Approximations*, Wiley, 1983

[92] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, *The Finite Element Method*, Vol I und II, McGraw-Hill, 4 edition, 1989/91

[93] A. M. Bruaset, *A Survey of Preconditioned Iterative Methods*, Addison–Wesley Pitman, 1995

[94] W. Hackbusch, *Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations*, Springer–Verlag, 1994

[95] O. Gaal, G. A. Medgyezi, L. Vereczkey, *Electrophoresis in separation of biological macromolecules*, Willey, Chichester, 1980

[96] W. D. Volkmuth, R. H. Austin, *DNA electrophoresis in microlithographic arrays*, Nature **358** (1992) 600

[97] W. D. Volkmuth, T. Duke, M. C. Wu, R. H. Austin, *DNA electrodiffusion in a 2d array of posts*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 2117

[98] G. W. Slater, H. L. Guo, G. I. Nixon, *Bidirectional transport of polyelectrolytes using self-modulating entropic ratchets*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 1170

[99] D. Ertas, *Lateral separation of macromolecules and polyelectrolytes in microlithographic arrays*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1548

[100] T. A. J. Duke, R. H. Austin, *Microfabricated sieve for the continuous sorting of macromolecules*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1552

[101] I. Derényi, R. D. Astumian, *ac-separation of particles by biased Brownian motion in a two-dimensional sieve*, Phys. Rev. E **58** (1998) 7781

[102] W. J. Moore, *Physical Chemistry*, 5th ed. (Longman, London, 1972)

[103] J. Kula, T. Czernik, J. Luczka, *Transport generated by dichotomic fluctuations*, Phys. Lett. A **214** (1996) 14

[104] A. van Oudenaarden, S. G. Boxer, *Brownian ratchet: molecular separation in lipid bilayers supported on patterned arrays*, Science **285** (1999) 1046

Danksagung

Zunächst möchte ich Herrn Prof. Dr. J. Zittartz danken, der die Durchführung dieser Diplomarbeit ermöglicht hat.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv. Doz. Dr. A. Schadschneider für die Anregung zu dieser Arbeit und die gute fachliche Betreuung.

Weiterhin danke ich den Herren Dr. P. Reimann, Priv. Doz. Dr. D. Kölle und Dr. S. Weiss für die motivierenden Gespräche zu Beginn dieser Arbeit.

Für das Korrekturlesen dieser Arbeit geht mein Dank an Andreas Schadschneider, Frank Zielen, Ansgar Kirchner, Christian Scheeren, Kai Klauck, Thorsten Knetter und Claudia und Gerd Schröder. ♡♡♡

Meinen Eltern danke ich dafür, daß sie mich während meines gesamten Ausbildung in jeder erdenklichen Art und Weise unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß die vorliegende Arbeit von mir selbstständig angefertigt wurde. Dabei habe ich außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel verwendet.

Frank Brücher