Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 1

1. Es sei x eine zufällige Größe mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung ($\beta > 0$)

$$W(x) = A \cdot \exp(-\beta x^2/2)$$

   - Bestimmen Sie A derart, dass $W(x)$ auf eins normiert ist. Wie hängt β mit $\langle x^2 \rangle$ zusammen?
   - Berechnen Sie die erzeugende (oder charakteristische) Funktion

$$Z(\alpha) = \langle \exp(i\alpha x) \rangle$$

   Wie lassen sich die Momente $\langle x^n \rangle$ aus $Z(\alpha)$ gewinnen?

2. Betrachten Sie, in einer Verallgemeinerung der vorherigen Aufgabe, mehrere zufällige Größen $x_1, x_2, \ldots x_N$ mit

$$W(x_1, x_2, \ldots x_N) = A \cdot \exp(-\frac{1}{2} \sum_{n,m} x_n \beta_{nm} x_m)$$

   wobei β eine reelle symmetrische positiv-definite Matrix ist.

   - Bestimmen Sie A. Zeigen Sie: $\langle x_n x_m \rangle = (\beta^{-1})_{nm}$.
   - Zeigen Sie weiterhin:

$$Z(\alpha_1, \ldots \alpha_N) = \langle \exp(i \sum_n \alpha_n x_n) \rangle = \exp(-\frac{1}{2} \sum_{n,m} \alpha_n \alpha_m \langle x_n x_m \rangle)$$

3. Untersuchen Sie ein ideales Gas mit Volumen V_0, Teilchenzahl N_0, und in diesem ein Untersystem mit $V \ll V_0$, $N \ll N_0$.

   - Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung $W(N)$ gegeben ist durch

$$W(N) = \frac{N_0!}{N!(N_0 - N)!} \, p^N \, q^{N_0 - N}$$

   und bestimmen Sie p und q.
   - Leiten Sie daraus im Grenzfall $N_0 \to \infty$, $N_0 p = \text{constant} \ll N_0$ die Poisson-Formel her. Ist die Poisson-Verteilung normiert?
   - In welchem Grenzfall erhält man aus der Poisson-Verteilung die Gauß-Verteilung?

   Siehe auch: Landau-Lifschitz, Band V, § 114

4. Gegeben sind die Momente einer zufälligen Größe x: $\langle x^n \rangle = a^n$. Bestimmen Sie $Z(\alpha)$ und $W(x)$.

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 2

5. Die Langevin-Gleichung für einen gedämpften Oszillator ist gegeben durch

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + k_0 x = \hat{\xi}(t) \ ,$$

wobei $\hat{\xi}(t)$ eine gaußverteilte stochastische Kraft darstellt, mit

$$\langle\hat{\xi}(t)\rangle = 0 \quad ; \qquad \langle\hat{\xi}(t)\hat{\xi}(t')\rangle = Q \cdot K(t-t')$$

und $Q = 2\eta k_{\mathrm{B}}T$. Die Größe $D = k_{\mathrm{B}}T/\eta$ nennt man auch Diffusionskonstante. (Warum? Siehe Ergebnisse!) Verwenden Sie, dass im "klassischen" Grenzfall gilt: $K(t-t') = \delta(t-t')$. Setzen Sie in dieser Aufgabe außerdem $m = 0$.

   (a) Wie lautet die Fouriertransformierte, $K(\omega)$? Finden Sie $x(\omega)$ und daraus $\langle x^2\rangle \equiv \langle x(t)x(t)\rangle$.

   (b) Berechnen Sie $\langle x(t)x(t')\rangle$ und $\langle[x(t)-x(t')]^2\rangle$. Diskutieren Sie insbesondere den Spezialfall $k_0 = 0$.

6. Analog Aufgabe 5, aber für $m \neq 0$. Was ergibt sich für $\langle[x(t)-x(t')]^2\rangle$ im Grenzfall $k_0 \to 0$? Diskutieren Sie das Ergebnis für kleine und große Zeiten.

7. Eine Verallgemeinerung der Langevin-Gleichung aus Aufgabe 5 erhält man durch folgende Modifikation des Rauschspektrums:

$$K(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\coth\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T} \ .$$

Die Gleichung heißt dann „Quanten-Langevin-Gleichung". In welchem Grenzfall ergibt sich das „weiße" Rauschen aus Aufgabe 5?

   (a) Bestimmen Sie $K(t-t')$ für $T \to 0$. Führen Sie dazu eine Abschneidefrequenz ω_c ein ($\omega_c \gg \omega_0$, $\omega_c \gg \gamma$, wobei $\omega_0^2 = k_0/m$, $\gamma = \eta/m$).

   (b) Berechnen Sie $\langle x^2\rangle$ für $T \to 0$ und insbesondere für $\gamma \ll \omega_0$ und $\gamma \gg \omega_0$. Wie hängt $\langle x^2\rangle$ im Grenzfall $\gamma \ll \omega_0$ mit der Breite eines harmonischen Oszillators im Grundzustand zusammen?

   (c) Diskutieren Sie mit diesen Ergebnissen die Frage: Welchen Einfluss hat Dämpfung auf die Breite der Wellenfunktion eines quantenmechanischen Teilchens?

Siehe auch: A. Schmid, On a Quasiclassical Langevin Equation, J. Low Temp. Phys. **49**, 609 (1982); DOI: 10.1007/BF00681904

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 3

8. Betrachten Sie die bedingte Wahrscheinlichkeit für einen räumlich und zeitlich diskreten Prozess, $P_{\ell,n} \equiv P(x = \ell a, t = n\tau | \ell_0 a, 0)$, wobei a die Gitterkonstante und τ die Dauer eines Zeitschritts ist: $n = 0, 1, 2, \ldots; \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Ein "Random Walk" auf einem eindimensionalen Gitter wird beschrieben durch

$$P_{\ell,n} = W_+ P_{\ell-1,n-1} + W_- P_{\ell+1,n-1} \ . \tag{1}$$

   (a) Interpretieren Sie diese Gleichung. Warum sollte $W_+ + W_- = 1$ gelten?

   (b) Finden Sie $P_{\ell,n}$ durch Fouriertransformation in der "Ortsvariablen" ℓ. **Hinweis:** $P_{\ell,0} = \delta_{\ell,\ell_0}$.

   (c) Berechnen Sie $\langle \ell \rangle$, $\langle \ell^2 \rangle$ und $\langle (\Delta\ell)^2 \rangle = \langle \ell^2 \rangle - \langle \ell \rangle^2$ mit Hilfe der Fouriertransformation aus (b).

   (d) Finden Sie die zu (1) entsprechende Mastergleichung (kontinuierlich in der Zeit).

   (e) Finden Sie die zu (1) entsprechende Fokker-Planck-Gleichung (kontinuierlich in Raum und Zeit). **Hinweis:** $\tau \to 0$, $a \to 0$. Schreiben Sie außerdem $W_\pm = (1 \pm d)/2$, und halten Sie $a^2/2\tau \equiv D$ und $da/\tau \equiv v$ fest. *Resultat:* $\partial_t P(x,t) = D\partial_x^2 P(x,t) - v\partial_x P(x,t)$.

   (f) Finden Sie die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung mit der Anfangsbedingung $P(x, 0) = \delta(x)$; berechnen Sie $\langle x^2 \rangle$ und $\langle (\Delta x)^2 \rangle$, und vergleichen Sie mit den Resultaten aus (c).

9. Die Fokker-Planck-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $W(x,t)$ hat für ortsabhängige Kräfte $F(x) = -\partial_x U(x)$ die Form

$$\partial_t W = \left[D\partial_x^2 - \eta^{-1}\partial_x F \right] W \ ,$$

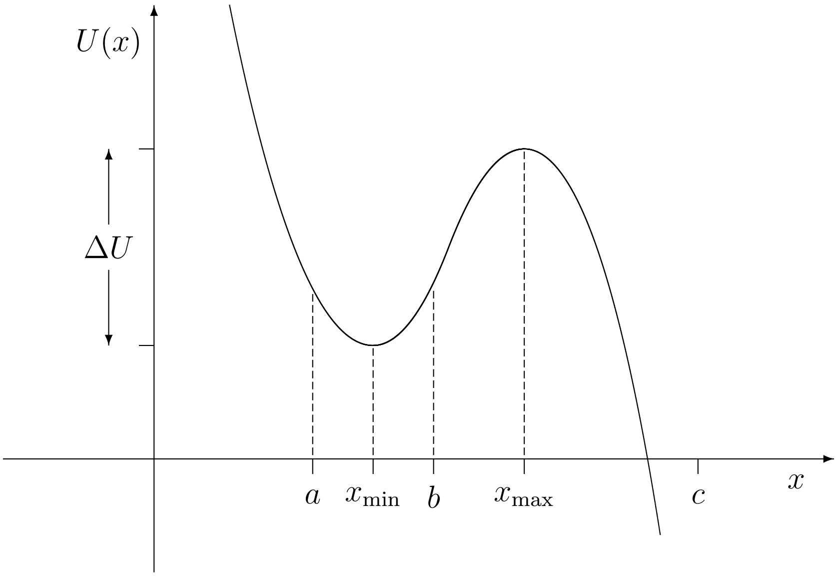
   wobei $D = k_\mathrm{B} T/\eta$ die Diffusionskonstante ist.

   (a) Vergleichen Sie mit Aufgabe 8(e).

   (b) Finden Sie die stationäre Lösung, $W_0(x)$.

   (c) Die Fokker-Planck-Gleichung ist offensichtlich von der Form $\dot{W} = \hat{L}W$. Ist $\hat{L}$ ein hermitescher Operator? [$\hat{L}$ heißt auch Fokker-Planck-Operator.]

   (d) Finden Sie die Bewegungsgleichung für $\mathcal{W}(x,t) = W(x,t)/[W_0(x)]^{1/2}$. Vergleichen Sie das Resultat mit der Schrödinger-Gleichung. Identifizieren Sie die "potentielle Energie" und die "Masse".



10. Bestimmen Sie mit Hilfe der Fokker-Planck-Gleichung aus Aufgabe 9 die Zerfallsrate für ein Potential mit einem metastabilen Minimum im Grenzfall Potentialbarriere $\Delta U \gg k_{\mathrm{B}}T$ (Kramers, 1940).

    (a) Schreiben Sie die Fokker-Planck-Gleichung zuerst in der Form $\partial_t W = -\partial_x S$, wobei der Wahrscheinlichkeitsstrom gegeben ist durch

    $$S = -De^{-U/k_{\mathrm{B}}T}\partial_x \left[e^{U/k_{\mathrm{B}}T} W\right] \ . \tag{2}$$

    (b) Im betrachteten Grenzfall können quasistationäre Bedingungen angenommen werden, d. h. die Änderung von $W(x,t)$, das bei $x_{\min}$ lokalisiert ist, ist klein. Außerdem ist S sehr klein und praktisch unabhängig von x, und $W(x \simeq c, t) \simeq 0$. Integrieren Sie (2), nach Multiplikation mit $\exp(U/k_{\mathrm{B}}T)$, von $x_{\min}$ bis c unter diesen Voraussetzungen.

    (c) Berechnen Sie

    $$p = \int_a^b dx \, W(x,t)$$

    durch Entwicklung um $x_{\min}$. Im Bereich $a \leq x \leq b$ kann

    $$W(x,t) \simeq W(x_{\min},t) W_0(x)/W_0(x_{\min})$$

    gesetzt werden.

    (d) Bestimmen Sie dann die Zerfallsrate aus $\Gamma = S/p$. Zeigen Sie:

    $$\Gamma \simeq (2\pi\eta)^{-1} \left|U''(x_{\min})U''(x_{\max})\right|^{1/2} e^{-\Delta U/k_{\mathrm{B}}T} \ ,$$

    wobei $\Delta U = U(x_{\max}) - U(x_{\min})$. Drücken Sie das Ergebnis aus durch $\omega_0^2 = U''(x_{\min})/m$, $\omega_1^2 = -U''(x_{\max})/m$ und $\gamma = \eta/m$.

Literatur: Risken, Kap. 5; speziell Kap. 5.10 für Aufgabe 10.

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 4

11. Der Propagator $K(x,t|y,t_0) = \Theta(t-t_0)\,\langle x \left| e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \right| y\rangle$ kann als Summe über die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators H,

$$K(x,t|y,t_0) = \Theta(t-t_0) \sum_\lambda \phi_\lambda(x)\phi_\lambda^*(y) e^{-i\epsilon_\lambda(t-t_0)/\hbar} \;, \tag{1}$$

oder als Wegintegral,

$$K(x,t|y,t_0) = \Theta(t-t_0) \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \cdots \int dx_N \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_N\right\} \tag{2}$$

$$S_N = \varepsilon \sum_{j=0}^{N} \left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right] \;\; ; \;\; \varepsilon \equiv \frac{t-t_0}{N+1} \;,\; x_0 \equiv y \;,\; x_{N+1} \equiv x \;,$$

dargestellt werden. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass der Ortsraum eindimensional ist ($d=1$).

(a) Berechnen Sie den Propagator eines freien Teilchens [$V(x)=0$] mit Hilfe der Wegintegraldarstellung (2).
Hinweis: Nutzen Sie die Translationsinvarianz des Problems aus.

(b) Berechnen Sie analog den Propagator eines Teilchens in einem uniformen Kraftfeld [$V(x) = -fx$].

(c) Zeigen Sie erstens anhand der Darstellung (1) und zweitens explizit für ein freies Teilchen die Relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\; K^*(x,t|y,0)K(x,t|z,0) = \Theta(t)\delta(y-z)$$

und interpretieren Sie dieses Ergebnis.

(d) Berechnen Sie den Propagator eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators, ausgehend von der Darstellung (1). **Hinweis:** Verwenden Sie die Definition der Hermite-Polynome, $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$ (Rodrigues-Formel).

(e) Bestimmen Sie durch geeignete analytische Fortsetzung des Ergebnisses aus (d) den euklidischen Propagator,

$$K_E(x,\beta|y,0) = \Theta(\beta) \sum_\lambda \phi_\lambda(x)\phi_\lambda^*(y) e^{-\beta\epsilon_\lambda} \;.$$

[Das Ergebnis finden Sie auch im Skriptum auf Seite 27.]

(f) Berechnen Sie daraus die Zustandssumme des harmonischen Oszillators,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx K_E(x,\beta|x,0) \;.$$

Vergleichen Sie mit dem auf „üblichem“ Weg, $Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta\epsilon_n)$, gewonnenen Resultat ($\epsilon_n = \hbar\omega_0(n+1/2)$).

12. Berechnen Sie die sogenannte „Fluktuationsdeterminante" des harmonischen Oszillators,

$$D = \det \mathcal{H} / \det \mathcal{H}_0 \, .$$

Hier wird ein Zeitintervall $0 \ldots \beta$ zugrundegelegt; $\mathcal{H} = -\partial^2/\partial\tau^2 + \omega_0^2$, und $\mathcal{H}_0 = -\partial^2/\partial\tau^2$. Berechnen Sie D für periodische und feste (verschwindende Eigenfunktionen bei 0 und β) Randbedingungen. In welchem Zusammenhang treten diese Randbedingungen auf?
Hinweis: Ein eventuell auftretender Eigenwert null ist auszuschließen.
Literatur: S. Coleman, Aspects of Symmetry, Appendix 1.

13. Die zeitliche Entwicklung des Ordnungsparameters sei durch folgende Relaxationsgleichung beschrieben:

$$\eta \frac{\partial}{\partial t} m = -\frac{\delta}{\delta m} \widetilde{\Delta F} \tag{3}$$

Der Ordnungsparameter $m = m(x,t)$ sei einkomponentig ($n = 1$) und die räumliche Dimension eins ($d = 1$). Dabei ist $\widetilde{\Delta F} = \int dx \, \widetilde{\Delta f}$, mit

$$\widetilde{\Delta f} \equiv f_0 \left[\tau m^2/2 + b m^4/4 - m h + \xi_0^2 \left(\partial m / \partial x \right)^2 /2 \right]$$

und $\tau \equiv (T - T_c)/T_c$, wobei $|\tau| \ll 1$ gelten soll.

(a) Berechnen Sie die Variationsableitung $\delta \widetilde{\Delta F} / \delta m$.

(b) Diskutieren Sie die stationären Lösungen m_0 von (3) für den Fall, dass m nicht von x abhängt (zur Vereinfachung: $h = 0$).

(c) Für $h = 0$ und $\tau < 0$ gibt es eine stationäre Lösung der Form $m(x) = c \cdot \tanh(ax)$ (Bloch-Wand). Bestimmen Sie die Konstanten c und a. Wie hängt die Dicke der Bloch-Wand ($= a^{-1}$) von der Temperatur ab?

(d) Wir betrachten den räumlich homogenen Fall für $h = 0$ und $\tau > 0$ (d.h. der m^4-Term kann vernachlässigt werden): Wie hängt $m(t)$ von der Zeit ab, wenn $m(t = 0) \neq m_0$? Wie hängt die Relaxationszeit von der Temperatur ab?

(e) Wir betrachten den räumlich homogenen Fall für $h = 0$ und $\tau < 0$: Linearisieren Sie dazu (3) um $m_0 = |\tau/b|^{1/2}$, d.h. setzen Sie $m = m_0 + \delta m$ und entwickeln Sie bis zur ersten Ordnung. Vergleichen Sie die Relaxationszeit für $\tau < 0$ mit der für $\tau > 0$.

(f) Berechnen Sie für $\tau > 0$ (ohne m^4-Term) die Antwort des Ordnungsparameters auf ein externes Feld der Form: $h(x,t) = \delta h(q,\omega) \exp[i(qx - \omega t)]$. Setzen Sie dazu an: $m(x,t) = \delta m(q,\omega) \exp[i(qx - \omega t)]$. Bestimmen Sie die Antwortfunktion $\chi(q,\omega) = \delta m(q,\omega)/\delta h(q,\omega)$.

(g) Weiterhin sei $\tau > 0$, aber die Dimension $d = 3$. Bestimmen Sie die Korrelation statischer Fluktuationen, $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \rangle$.

(h) Ergänzen Sie (3) zu einer Langevin-Gleichung. Wie ist die stochastische Kraft zu wählen?

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 5

14. Die Bewegungsgleichungen, die die zeitliche Entwicklung der Phasendifferenz des Ordnungsparameters in einem Josephson-Kontakt (zwei schwach gekoppelte Supraleiter) beschreiben, sind von der folgenden Form (ohne Rauschterm):

$$\hbar\dot{\varphi} = 2eV$$
$$C\dot{V} + R^{-1}V + I_c \sin(\varphi) = I \ ,$$

wobei φ die Phasendifferenz, V die Spannung, C die Kapazität, R den Widerstand, I_c den kritischen Strom und I den Strom darstellt.

(a) Schreiben Sie diese Gleichungen in der Form „gedämpftes Teilchen in einem Potential". Diskutieren Sie die möglichen Lösungen, insbesondere den Unterschied $I < I_c$ versus $I > I_c$. Warum nennt man I_c „kritischen Strom"? Wählen Sie die Faktoren derart, dass als Potential $U(\varphi) = -(\hbar I_c/2e)\cos(\varphi) - (\hbar I/2e)\varphi$ auftritt.

(b) Ergänzen Sie die Gleichung in „üblicher" Weise um einen Rauschterm geeigneter Stärke.

(c) Betrachten Sie im Folgenden den Grenzfall großer Dämpfung („Masse" gleich Null setzen), aber zunächst die deterministische Gleichung. Bestimmen Sie die Spannungs-Strom-Charakteristik, d. h. den Zusammenhang zwischen der zeitlich gemittelten Spannung $\bar{V}$ und dem Strom.

(d) Wie ändert sich die Spannungs-Strom-Charakteristik bei Berücksichtigung thermischer Fluktuationen? Betrachten Sie wiederum den überdämpften Fall und stellen Sie die entsprechende Fokker-Planck-Gleichung auf. Suchen Sie eine stationäre Lösung mit einem konstanten Wahrscheinlichkeitsstrom (der einer endlichen mittleren Spannung entspricht!).

- Wie hängt der Wahrscheinlichkeitsstrom mit der mittleren Spannung $\bar{V}$ zusammen?
- Welcher Parameter (in [1], Seite 210 mit u bezeichnet) bestimmt, ob die Fluktuationen einen großen Einfluss haben? Was ergibt sich für $u \to 0$ und $u \gg 1$?
- Bestimmen Sie das Verhältnis $\bar{V}/I$ für $I \to 0$. Im Ergebnis sollte eine modifizierte Besselfunktion $I_0(u/2)$ auftreten. Was ergibt sich für $u \to 0$?
- Wie lässt sich dieses Ergebnis für den „aktivierten" Widerstand im Limes $u \to \infty$, wobei $I \ll I_c$ festgehalten wird, qualitativ mithilfe von Kramers' Resultat für die Zerfallsrate erklären?

Literatur

[1] M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, Kap. 6.3.

[2] V. Ambegaokar and B. I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **22**, 1364 (1969).

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 6

Ergänzungen zum Extra-Kapitel "Quantenmechanik dissipativer Objekte"

15. Betrachten Sie explizit die beiden folgenden Modelle für die Kopplung eines Objekts (Operatoren $\hat{p}$, $\hat{q}$) an eine Umgebung, die durch harmonische Oszillatoren (Operatoren $\hat{p}_\alpha$, $\hat{x}_\alpha$) genähert wird.

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) + \hat{q}\sum_\alpha C_\alpha \hat{x}_\alpha + \sum_\alpha h_\alpha(\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\alpha)$$

wobei

$$h_\alpha(\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\alpha) = \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 \hat{x}_\alpha^2 \ ,$$

und

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) + \sum_\alpha h_\alpha\left(\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\alpha + \frac{C_\alpha}{m_\alpha \omega_\alpha^2}\hat{q}\right) \ .$$

Bestimmen Sie in beiden Fällen die effektive Wirkung, die sich nach Integration über die Umgebung ergibt:

$$Z = \mathrm{Sp}\exp(-\beta\hat{H}) = \mathrm{Sp}_q \mathrm{Sp}_{\{x_\alpha\}}\exp(-\beta\hat{H}) \sim \int \mathcal{D}q \exp(-S_{\mathrm{eff}}[q]/\hbar) \ ,$$

und vergleichen Sie die Ergebnisse. Führen Sie die Funktion

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{2\hbar}\sum_\alpha C_\alpha^2 \, \langle x_\alpha(\tau) x_\alpha(\tau')\rangle_{\{x_\alpha\}}$$

ein (wie in der Vorlesung).

16. Zeigen Sie mithilfe der Wegintegraldarstellung:

$$\langle x_\alpha(\tau) x_\alpha(\tau')\rangle_{\{x_\alpha\}} = \frac{1}{\beta}\sum_\omega \mathrm{e}^{-i\omega(\tau-\tau')}\frac{1}{m_\alpha(\omega^2 + \omega_\alpha^2)} \ ,$$

wobei die Summe über die Frequenzen $\omega = 2\pi n/\hbar\beta$ mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ (Matsubara-Bose-Frequenzen) auszuführen ist. Bestimmen Sie mithilfe dieser Formel die gleichzeitige Korrelation

$$\langle x_\alpha(\tau) x_\alpha(\tau)\rangle_{\{x_\alpha\}}$$

für $T \to 0$ und $T \to \infty$ ($k_B T \ll \hbar\omega_\alpha$ bzw. $k_B T \gg \hbar\omega_\alpha$). Überprüfen Sie, ob diese Ergebnisse mit den bekannten Resultaten für einen harmonischen Oszillator übereinstimmen. Hinweis: Letztere ergeben sich am Einfachsten mithilfe des Gleichverteilungssatzes:

$$\langle\frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m_\alpha}\rangle = \langle\frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2\hat{x}_\alpha^2\rangle = \frac{1}{2}\langle\hat{h}_\alpha\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega_\alpha\left(\langle\hat{n}_\alpha\rangle + \frac{1}{2}\right)$$

wobei $\langle\hat{n}_\alpha\rangle = b(\omega_\alpha)$.

17. Berechnen Sie
$$\langle \hat{x}_\alpha(\tau)\hat{x}_\alpha(\tau')\rangle$$
mithilfe der Operatordarstellung, wobei der Mittelwert wie üblich über
$$\langle (.)\rangle = \mathrm{Sp}(.)\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{h}_\alpha}/\mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{h}_\alpha}$$
definiert ist.

18. Zeigen Sie weiterhin:
$$\alpha(\tau-\tau') = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}J(\omega)[-b(-\omega)]\mathrm{e}^{-\omega|\tau-\tau'|} \quad ; \quad b(-\omega) = [\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega}-1]^{-1}$$
wobei
$$J(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha\omega_\alpha}\,\delta(\omega-\omega_\alpha) \quad , \quad \omega > 0$$
Wenn wir $\omega_\alpha > 0$ annehmen, definiert die letztere Relation $J(\omega)$ nur für positive ω. Wir definieren weiter: $J(\omega) = -J(-\omega)$ für $\omega < 0$.

19. Wählen Sie $J(\omega) \simeq \eta\omega$ und berechnen Sie $\alpha(\tau-\tau')$ explizit für $T=0$ ($\beta\to\infty$) sowie für endliche Temperatur. Hinweis (siehe Gradshteyn-Ryzhik, 1.422.4):
$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(\tau-\tau'+k\cdot\hbar\beta)^2} = \left[\frac{\pi/\hbar\beta}{\sin(\pi(\tau-\tau')/\hbar\beta)}\right]^2$$

Tipp zum Schluss: Da die obigen Formeln nur von $\tau-\tau'$ abhängen, ist es bequem, von Anfang an $\tau'=0$ zu setzen!

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 7

20. Zeigen Sie, dass die verallgemeinerte Suszeptibilität $\chi(z)$ (mit $z = \omega + i\eta$, $\eta \geq 0$) nur für $\omega = 0$ reell ist und auf der imaginären Achse für wachsendes η monoton abfällt. Die Voraussetzung hierfür ist: $\chi''(z) \neq 0$ für $\eta = 0$. Was bedeutet diese Bedingung? **Literatur:** Landau-Lifschitz, Band 5, §123.

21. Diskutieren Sie die *statische* Suszeptibilität, χ_{stat}, mit Hilfe der klassischen und der Quantenstatistik, jeweils in der kanonischen Gesamtheit. Es sei $\hat{H} = \hat{H}_0 - f\hat{X}$, wobei f ein konstantes externes Feld ist.
    (a) Zeigen Sie, dass $\langle \hat{X} \rangle \equiv \text{Sp}\left(\hat{X}\hat{W}\right) = -\partial F/\partial f$ gilt, wobei $F = -\beta^{-1} \ln Z$ die Freie Energie bezeichnet.
    (b) Zeigen Sie, dass für den klassischen Grenzfall $\chi_{\text{stat}} = \beta\langle\left(\hat{X} - \langle\hat{X}\rangle\right)^2\rangle_{f=0}$ gilt.
    (c) Zeigen Sie, dass für den allgemeinen Fall:
    $$\chi_{\text{stat}} = \int_0^\beta d\lambda \, \langle e^{\lambda \hat{H}_0} \hat{X} e^{-\lambda \hat{H}_0} \hat{X} \rangle_{f=0} \; .$$
    Zur Vereinfachung dürfen Sie annehmen, dass $\langle \hat{X} \rangle = 0$ gilt. Was ergibt sich, wenn $\hat{X}$ eine erhaltene Größe ist?
    (d) Stellen Sie χ_{stat} mit Hilfe der Eigenzustände von $\hat{H}_0$ dar: $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$; eine bequeme Notation hierbei ist: $W_n \equiv e^{-\beta E_n}/Z$, wobei $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$.

22. Diskutieren Sie die lineare Antwort eines Elektronengases auf ein elektrostatisches Potential $\phi(\mathbf{r})$ in der *Thomas-Fermi*-Näherung. Gehen Sie dazu von der lokalen Energie-Impuls-Relation aus,
    $$E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\phi(\mathbf{r}) \; , \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \; ,$$
    und berechnen Sie die Änderung der Ladungsdichte, linear in ϕ (d. h. $\delta\rho = -\chi_{\text{stat}}\,\phi$). Hierbei ist die Ladungsdichte durch
    $$\rho(\mathbf{r}) = 2e\Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}} f_{\text{F}}\left(E(\mathbf{p}, \mathbf{r})\right)$$
    gegeben, wobei $f_{\text{F}}(E)$ die Fermi-Funktion und Ω das Volumen darstellt. Berechnen Sie χ_{stat} insbesondere für tiefe und hohe Temperaturen. Wann ist die Thomas-Fermi-Näherung anwendbar?

23. Berechnen Sie $\chi_{\text{stat}}(\mathbf{q})$ für beliebige $\mathbf{q}$ durch Verallgemeinerung der Ergebnisse von Aufg. 16, (c) und (d). Ausgangspunkt sei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, wobei
    $$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \; , \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$$
    $$\hat{V} = e\Omega \sum_{\mathbf{q}} \phi(-\mathbf{q}) \hat{n}(\mathbf{q}) \; , \quad \hat{n}(\mathbf{q}) = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \; .$$

(a) Begründen Sie diese Darstellung.

(b) Zeigen Sie, dass

$$\chi_{\text{stat}}(\mathbf{q}) = -2e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{f_{\mathrm{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f_{\mathrm{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} .$$

(c) Berechnen Sie χ_{stat} für $q \ll k_{\mathrm{F}}$, $T \ll E_{\mathrm{F}}/k_{\mathrm{B}}$.

(d) Berechnen Sie χ_{stat} für $T = 0$, und zwar für Dimensionen $d = 3$ und $d = 1$. Diskutieren Sie das Ergebnis.

(e) Wie hängt $\chi_{\text{stat}}(\mathbf{q})$ mit der statischen Dielektrizitätsfunktion zusammen?

(f) Was folgt aus (e) für die Abschirmung einer Testladung? Wie groß ist die Abschirmlänge? - Geben Sie typische Zahlenwerte an.

Literatur: Ashcroft + Mermin, S. 337-344.

24. Diskutieren Sie die *dynamische* Antwort eines Elektronengases im Grenzfall $T = 0$. Gehen Sie aus von dem Resultat, das auch für $T \neq 0$ gültig ist:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -2e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{f_{\mathrm{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f_{\mathrm{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega + i\delta} ,$$

wobei der Limes $\delta \to 0$ zu nehmen ist. Außerdem ist die Dielektrizitätsfunktion gegeben durch

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi}{q^2} \chi(\mathbf{q}, \omega) .$$

(a) Der Imaginärteil der Dielektrizitätsfunktion, $\epsilon'' \equiv \mathrm{Im}\ \epsilon$, ist Null für große Frequenzen. Wie groß muss ω bei festem q sein, damit dies der Fall ist? Was bedeutet dieses Resultat?

(b) Zeigen Sie, dass im Limes $q \to 0$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) \sim 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \qquad (q \to 0)$$

gilt, und bestimmen Sie die Plasmafrequenz ω_p. Was bedeutet dieses Resultat?

Universität Augsburg
Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Prof. Dr. Ulrich Eckern

Übungen zu "Nonequilibrium Statistical Physics" — SoSe 2020

Blatt 8

25. Das zentrale Objekt der kinetischen Gastheorie ist die Verteilungsfunktion $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ definiert derart, dass die Dichte, Stromdichte und Energiedichte gegeben sind als ($d\mathbf{p} \equiv d^3p/(2\pi\hbar)^3$):

$$\left\{ \begin{array}{c} n \\ \mathbf{j} \\ e \end{array} \right\} = \int d\mathbf{p} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \mathbf{p}/m \\ p^2/2m \end{array} \right\} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$$

Die Boltzmann-Gleichung ist von der Form

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = I[f]$$

wobei der Stoßoperator für Teilchen-Teilchen-Stöße die Eigenschaften

$$\int d\mathbf{p}\ (1, \mathbf{p}, p^2)\ I[f] = 0$$

hat.

(a) Leiten Sie aus der Boltzmann-Gleichung die Kontinuitätsgleichung her:

$$\dot{n} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

(b) Leiten Sie die Gleichung der Energieerhaltung her, und identifizieren Sie den Energiestrom $\mathbf{j}^e$:

$$\dot{e} + \nabla \cdot \mathbf{j}^e = \mathbf{j} \cdot \mathbf{F}$$

(c) Leiten Sie die Gleichung der Impulserhaltung her:

$$\frac{\partial}{\partial t} j_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \Pi^{\alpha\beta} = \frac{n F_\alpha}{m}$$

und identifizieren Sie den Impulstromdichtetensor $\Pi^{\alpha\beta}$.

26. Berechnen Sie die obigen Größen für ein Boltzmann-Gas im Gleichgewicht, d. h. für

$$f \to f_0 = n\lambda_T^3 \cdot \exp\left[-\frac{(\mathbf{p} - m\mathbf{v})^2}{2mk_BT} \right]$$

Berechnen Sie außerdem die Entropie und den Entropiestrom (hier e = 2.718...):

$$\left\{ \begin{array}{c} s \\ \mathbf{j}^s \end{array} \right\} = -k_B \int d\mathbf{p} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \mathbf{p}/m \end{array} \right\} f_0 \ln \frac{f_0}{\mathrm{e}}$$

27. Zeigen Sie, dass für eine zeitunabhängige Kraft von der Form $\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r})$ die stationäre Lösung der Boltzmann-Gleichung gegeben ist durch

$$f^{(\mathrm{st})} = f_0 \, \mathrm{e}^{-\beta U}$$

mit f_0 aus der vorhergehenden Aufgabe (mit $\mathbf{v} = 0$). Interpretieren Sie dieses Resultat.

28. Berechnen Sie die Viskositäten (η und ζ) und die Wärmeleitfähigkeit (κ) für ein Boltzmann-Gas. Gehen Sie aus von der linearisierten Boltzmann-Gleichung

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right] f_0 = -\frac{1}{\tau}\delta f$$

mit $\delta f = f - f_0$ (f_0 siehe oben).

(a) Berechnen Sie die linke Seite unter der Annahme $n = n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ und $T = T(\mathbf{r}, t)$ für kleine Abweichungen vom Gleichgewicht ($n_0 = \text{konst}$, $T_0 = \text{konst}$, $\mathbf{v}_0 = 0$). Benutzen Sie dabei die Gleichungen nullter Ordnung:

$$\dot{n} = -n\nabla \cdot \mathbf{v} \; ; \quad mn\dot{\mathbf{v}} = -\nabla P \; ; \quad \dot{\epsilon} = -(\epsilon + P)\nabla \cdot \mathbf{v}$$

mit $\epsilon = 3nk_BT/2$ und $P = nk_BT$. Das Resultat ist gleich $J_1 + J_2$ mit

$$J_1 = f_0 \left[\frac{p^2}{2mk_BT} - \frac{5}{2}\right]\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\nabla T}{mT}\right)$$

$$J_2 = \frac{f_0}{2mk_BT}\left[p_\alpha p_\beta - \frac{p^2}{3}\delta_{\alpha,\beta}\right]\Lambda_{\alpha,\beta}$$

(b) Zeigen Sie:

$$\int d\mathbf{p} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \mathbf{p} \\ p^2 \end{array} \right\} (J_1 + J_2) = 0$$

und begründen Sie dieses Resultat.

(c) Zeigen Sie, dass $\Lambda_{\alpha,\beta}$ gegeben ist durch

$$\Lambda_{\alpha,\beta} = \nabla_\alpha v_\beta + \nabla_\beta v_\alpha - \frac{2}{3}\,\delta_{\alpha,\beta}\,(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

und dass gilt: $\mathrm{Sp}\Lambda = 0$.

(d) Berechnen Sie $\mathbf{j}_D^e$ und Π_D mit Hilfe von $\delta f = -\tau(J_1 + J_2)$, und daraus η und κ. Warum ist offensichtlich $\zeta = 0$? Definitionen:

$$\mathbf{j}_D^e = -\kappa\,\nabla T \; ; \quad m\Pi_D^{\alpha,\beta} = -\eta\,\Lambda_{\alpha,\beta} - \zeta\,\delta_{\alpha,\beta}\,(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

29. In einfachen Fällen ist die Boltzmann-Gleichung für Elektronen in Metallen, d. h. wenn nur die Streuung an Störstellen berücksichtigt wird, gegeben durch

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right] f = -\frac{1}{\tau}\,(f - \langle f\rangle)$$

mit $\tau^{-1} = n_i v_F \sigma_{\mathrm{tot}}$, n_i = Dichte der Störstellen; $\langle f\rangle$ ist der Mittelwert über alle *Impulsrichtungen*.

(a) Zeigen Sie, dass Teilchenzahl- und Energieerhaltung von der üblichen Form sind. Was ändert sich bei der Impulserhaltung? Warum?

(b) Berechnen Sie mit Hilfe dieser Gleichung für tiefe Temperaturen ($T \ll T_F$) und für $|\mathbf{q}| = 0$, $\omega \to 0$ die Leitfähigkeit, die Wärmeleitfähigkeit und die Thermospannung. Leiten Sie dazu zunächst die linearisierte Boltzmann-Gleichung her; setzen Sie $f = f_0 + \delta f$, $\delta f \ll f_0$, wobei f_0 die Fermi-Funktion bezeichnet.

30. Berechnen Sie mithilfe der linearisierten Transportgleichung – siehe vorhergehende Aufgabe – die Leitfähigkeit (für $T \ll T_F$):

(a) Zuerst für $|\mathbf{q}| = 0$, ω beliebig.

(b) Beliebige $\mathbf{q}$, ω. Es ist sinnvoll, bei der Rechnung zunächst $\langle f \rangle$ zu bestimmen.

(c) Leiten Sie dann aus dem allgemeinen Ergebnis die Leitfähigkeit für $\omega\tau \ll 1$, $v_F q \tau \ll 1$ explizit her. Identifizieren Sie die Diffusionskonstante.

31. Die Wechselwirkungsenergie eines Elektrons mit einem geladenen, aber abgeschirmten Defekt sei

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{eQ}{r} \mathrm{e}^{-r/\lambda_{\mathrm{TF}}} \ .$$

(a) Berechnen Sie den differentiellen und den totalen Wirkungsquerschnitt in Born'scher Näherung. Setzen Sie $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p_F$.

(b) Schätzen Sie den totalen Wirkungsquerschnitt ab für typische Werte von p_F und λ_{TF}. Ist die Born'sche Näherung anwendbar?

Literatur: Landau-Lifschitz, Quantenmechanik, § 125.

32. Im Allgemeinen hat der Stoßoperator für die Streuung von Elektronen an Störstellen die folgende Form:

$$I[f] = -\int d\mathbf{p}'\, Q(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\, [f(\mathbf{p}) - f(\mathbf{p}')]$$

wobei mikroskopische Reversibilität, $Q(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = Q(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, vorausgesetzt ist. Da die Streuung elastisch ist, kann man ansetzen:

$$Q(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \tilde{\phi}(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \cdot \delta(\epsilon_p - \epsilon_{p'}) \ .$$

(a) In welchem Spezialfall gilt die einfache Form aus Aufgabe 29? Drücken Sie, für den allgemeinen Fall, τ^{-1} durch $\tilde{\phi}$ aus.

(b) Wie hängt $\tilde{\phi}$ mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt zusammen?

(c) Zeigen Sie, dass die Leitfähigleit (für $|\mathbf{q}| = 0$, $\omega \to 0$, $T \ll T_F$) im Allgemeinen gegeben ist durch

$$\sigma = ne^2 \tau_{\mathrm{tr}}/m \ ,$$

wobei die Transportstoßzeit τ_{tr} definiert ist durch die folgende Relation:

$$\frac{1}{\tau_{\mathrm{tr}}} = n_i v_F \int d\Omega \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot (1 - \cos\theta) \ .$$

Dabei bezeichnet θ den Winkel zwischen $\mathbf{p}$ und $\mathbf{p}'$.