Nemegyensúlyi statisztikus fizika

1. előadás (3)

- perturbációszámítás → lineáris válasz elmélete

amit mérünk: - fizikai mennyiség várható értéke
- korrelációs függvények

- szabadsági fokok redukciója → makroszkopikus változók
  irreverzibilis termodinamika
  ↓
  sztochasztikus folyamatok
- kinetikus elméletek → Boltzmann-egyenlet
- számítógépes szimulációk

Lineáris válasz

$B(t)$ fizikai mennyiség   Zavar erőssége $f(t)$

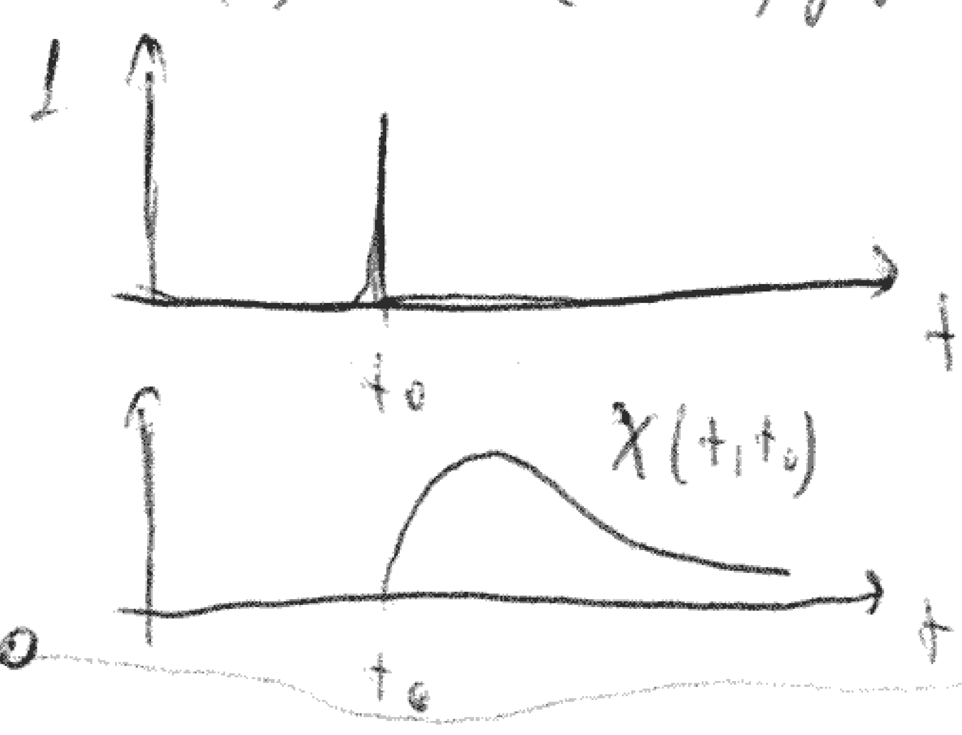
pl: mágneses tér $H(t)$, mágnesezettség $M(t)$

- Stacionárius állapot megzavarása

$$B(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t,t')\, f(t')\, dt' \quad \text{lineáris összefüggés}$$

- kauzalitás: $\chi(t,t') = 0$, ha $t' > t$
- stac. állapot $\Rightarrow$ időeltolási szimmetria $\Rightarrow$ $\chi(t,t') = \chi(t-t')$

pl: ha $f(t) = \delta(t-t_0)\, f_0$ $B(t) = \chi(t,t_0)\, f_0$



$$B(t) = \int_{-\infty}^{t} \chi(t-t')\, f(t')\, dt' = \int_0^{\infty} \chi(\tau)\, f(t-\tau)\, d\tau$$

$$t - t' := \tau$$

monokromatikus zavar: $f(t) = f_\omega e^{-i\omega t}$

$$B(t) = \int_0^{\infty} \chi(\tau)\, f_\omega e^{-i\omega t} e^{i\omega\tau}\, d\tau = f_\omega e^{-i\omega t} \underbrace{\int_0^{\infty} \chi(\tau)\, e^{i\omega\tau}\, d\tau}_{\chi(\omega)}$$

$B_\omega = \int_\omega \chi(\omega)$

$$\chi(\omega) = |\chi(\omega)|\, e^{i\delta(\omega)}$$

$\chi(t)$ valós

$$\chi(\omega)^* = \chi(-\omega)$$

$$\mathrm{Re}\,\chi(\omega) = \mathrm{Re}\,\chi(-\omega)$$

$$-\mathrm{Im}\,\chi(\omega) = \mathrm{Im}\,\chi(-\omega)$$

$\mathcal{F}$-tr. komplex frekvenciákra:

$$\chi(z) = \int_0^\infty x(\tau)\, e^{iz\tau}\, d\tau$$

emiatt integrálható a felső félsíkon
↓

$$e^{iz\tau} = e^{i\,\mathrm{Re}\,z\,\tau}\, e^{-\mathrm{Im}\,z\,\tau}$$

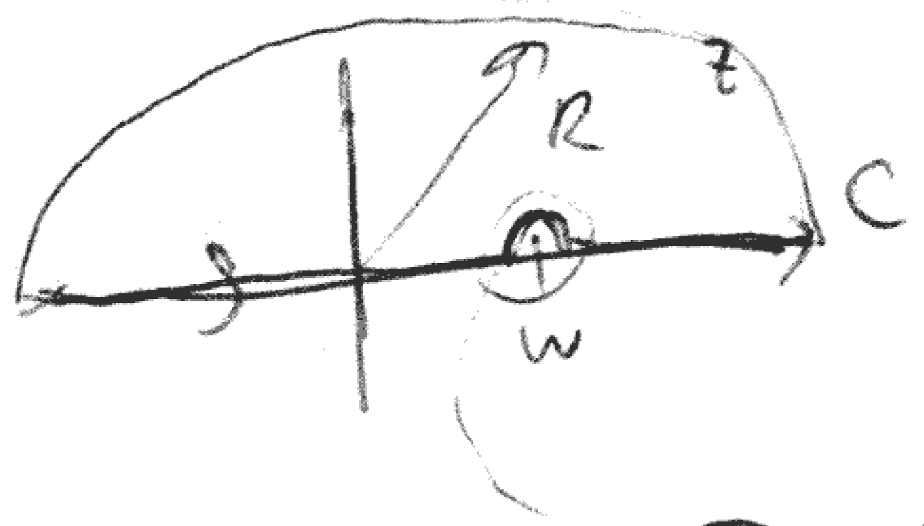
$\chi(z)$ a felső félsíkon létezik, és analitikus $(\mathrm{Im}\,z > 0)$

$\chi(\tau)$ általában nem cseng le ($\chi(\omega)$ nem létezik), de $\chi(z)$ akkor is létezik!

(Az alsó félsíkon nem, ott nem tudunk róla semmit)

Kramers – Kronig – reláció

$$\oint_C \frac{\chi(z)}{z-\omega}\, dz \qquad (\omega \text{ valós})$$



$$\boxed{\oint_C \frac{\chi(z)}{z-\omega}\, dz = 0}$$

$$z - \omega = \delta e^{i\varphi}$$

tfh: $\chi(z) \to 0 \quad (z \to \infty)$

R sugarú félkörön az integrál $\to 0 \quad (R \to \infty)$

$$0 = \underbrace{\int_{-\infty}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\, d\omega' + \int_{\omega+\delta}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\, d\omega'}_{\text{főértékintegrál } (\mathcal{P}\int\ldots)} + \underbrace{\int_{+\pi}^{0} \frac{\chi(\omega+\delta e^{i\varphi})}{\cancel{\delta e^{i\varphi}}}\, i\cancel{\delta e^{i\varphi}}\, d\varphi}_{(\delta\to 0)\ -i\chi(\omega)\pi}$$

$\delta \to 0$

$$\Rightarrow \boxed{0 = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\, d\omega' - i\chi(\omega)\pi}$$

$$\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Re}\,\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\, d\omega' = -\pi\, \mathrm{Im}\,\chi(\omega) \qquad \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\,\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\, d\omega' = \pi\, \mathrm{Re}\,\chi(\omega)$$

(Hilbert transzf.)

1, Kauzalitás $X(t) = 0$ $(t < 0)$

$\downarrow$

2, $X(z)$ analitikus a felső félsíkon

$\downarrow$

3, Kramers - Kronig - relációk

<u>Titchmarsh - tétel:</u> bármelyik állítás teljesül, abból következik a másik kettő.

<u>Kvantummechanika: időfüggés</u>

$H(t)$

Schrödinger - egyenlet: $i\hbar\dot{\psi}(t) = H(t)\psi(t)$

kezdeti feltétel: $\psi(t_0) = \psi_0$

unitér operátor

lineáris kapcsolat $\psi(t) = \hat{U}(t,t_0)\psi(t_0)$ (skalárszorzat invarianciája használ

$$i\hbar\frac{d}{dt}(\psi',\psi) = i\hbar(\dot{\psi}',\psi) + i\hbar(\psi',\dot{\psi}) = -(H\psi',\psi) + (\psi',H\psi) = -(\psi',H\psi) + (\psi',H\psi) = 0$$

$$(U(t,t_0)\psi_0, U(t,t_0)\psi_0) = (\psi_0,\psi_0)$$

$$(\psi_0, U^+(t,t_0)U(t,t_0)\psi_0) = (\psi_0,\psi_0) \quad \forall\psi_0\text{-ra} \Rightarrow U^+U = 1$$

$$i\hbar\dot{\psi}(t) = i\hbar\dot{U}(t,t_0)\psi_0 = HU(t,t_0)\psi_0 \quad \forall\psi_0\text{-ra}$$

$i\hbar\dot{U}(t,t_0) = HU(t,t_0)$

kezdeti feltétel: $U(t_0,t_0) = 1$

H független az időtől: $U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

<u>időfüggő eset:</u> $H + V(t)$

időfüggetlen, időfüggő perturbáció

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}S(t,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0} \qquad (S(t_0,t_0) = 1)$$

ha $V(t) = 0$ $\quad S(t,t_0) = 1$

$$i\hbar \dot{U}(t,t_0) = H S(t,t_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0} + e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\, i\hbar \dot{S}(t,t_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0} = (H+V(t))\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} S(t,t_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}$$

$$\boxed{i\hbar \dot{S}(t,t_0) = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\, V(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}\, S(t,t_0)}$$

$$\int_{t_0}^{t} \dot{S}(t',t_0)\, dt' = S(t,t_0) - \overbrace{S(t_0,t_0)}^{1}$$

$$\boxed{S(t,t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}\, V(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'}\, S(t',t_0)\, dt'}$$

<u>első rendben:</u>

$$S(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}\, V(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'}\, dt'$$

<u>lineáris válasz:</u>

$$V(t) = -A\, f(t)$$

zavar erőssége

rendszer egy fizikai mennyisége (operátor)

pl: $-\underline{P}\,\underline{E}(t)$ / $-\underline{M}\,\underline{H}(t)$

polarizáció, elektromos tér; mágnesezettség, mágneses tér

- visszahatás elhanyagolása
- klasszikus külső hatás

$$S(t,t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}\, A\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'}}_{\text{Heisenberg-képbeli operátor}}\, f(t')\, dt'$$

$$\langle B\rangle_t = \sum_\alpha p_\alpha \left(\psi_\alpha(t), B\psi_\alpha(t)\right) = \underline{Tr\left(\hat{\rho}(t)B\right)}$$

$$\left(\sum_\alpha p_\alpha = 1\right)$$

$$\langle B\rangle_t = \sum_\alpha p_\alpha \left(U(t,t_0)\psi_\alpha(t_0), B\, U(t,t_0)\psi_\alpha(t_0)\right) =$$

$$= \sum_\alpha p_\alpha \left(\psi_\alpha(t_0), \underbrace{U^+(t,t_0)\, B\, U(t,t_0)}\psi_\alpha(t_0)\right) = \underline{Tr\left(\hat{\rho}(t_0)\, U^+(t,t_0)\, B\, U(t,t_0)\right)} =$$

$$= Tr\left(U(t,t_0)\,\rho(t_0)\, U^+(t,t_0)\, B\right)$$

$$\boxed{\rho(t) = U(t,t_0)\,\rho(t_0)\, U^+(t,t_0)}$$

$$\langle B\rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}(t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_0}\, S^{+}(t,t_0)\, \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\, B\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{B(t)}\, S(t,t_0)\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht_0}\right)$$

kezdetben (t_0-ban) termikus egyensúlyban van: $\rho(t_0) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ $\quad Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$

$$\langle B\rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\left(1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} A(t')\, f(t')\, dt'\right) B(t) \left(1+\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} A(t')\, f(t')\, dt'\right)\right) =$$

f^2-el arányos tagokat már így is elhanyagoltuk

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\left[B(t) + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(B(t)A(t') - A(t')B(t)\right) f(t')\, dt'\right]\right)$$

első tag:

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\, B\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} B\right) = \langle B\rangle_0$$

$$\varphi_{BA}(t,t') := \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\left[B(t), A(t')\right]\right) = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[B(t), A(t')\right]\right\rangle_0$$

$$\langle B\rangle_t = \langle B\rangle_0 + \int_{t_0}^{t} \varphi_{BA}(t,t')\, f(t')\, dt'$$

$t_0 \to -\infty$

$$\boxed{\chi_{BA}(t,t') = \begin{cases} \varphi_{BA}(t,t') & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$\boxed{2.\ \text{előadás}}$ (2)

$$\langle B\rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \chi_{BA}(t-t')\, f(t')\, dt'$$

$t \to \infty \quad \rho_0 = \dfrac{e^{-\beta H}}{Z}$ (termikus egyensúly)

$\delta H = -A f(t)$

$$\chi_{BA} = \Theta(t)\,\varphi_{BA}(t) = \begin{cases} \varphi_{BA}(t) & t>0 \\ 0 & t<0 \end{cases}$$

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle [B(t), A(0)]\rangle = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}[B(t), A(0)]\right)$$

$$\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{\frac{i}{\hbar}Ht} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'} A e^{\frac{i}{\hbar}Ht'}\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')} B e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')} A\right)$$

monokromatikus zavar: $f(t) = f_\omega e^{-i\omega t} \underbrace{e^{\varepsilon t}}_{\text{adiabatikus bekapcsolás}}$ $(\varepsilon \to 0)$ (hogy $t=-\infty$-re eltűnjön)

$$\langle B\rangle_t = \int_0^\infty \varphi_{BA}(\tau) f(t-\tau)\,d\tau = f_\omega e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t} \underbrace{\int_0^\infty \varphi_{BA}(\tau)\, e^{i\omega\tau} e^{-\varepsilon\tau}\, d\tau}_{\chi_{BA}(z)|_{z=\omega+i\varepsilon}}$$

$e^{i(\omega+i\omega)\tau}$

$$\chi_{BA}(\underset{\text{valós}}{\omega}) = \lim_{\varepsilon\to 0}\chi_{BA}(\omega+i\varepsilon)$$

pl: lineáris oszcillátor: $H' = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2}_{H} \underbrace{- x f(t)}_{f(t)\text{ lineáris potenciálja}}$

$$\langle x\rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \varphi_{BA}^{xx}(t-t') f(t')\,dt' \qquad = \frac{i}{\hbar}\langle [x(t), x(0)]\rangle$$

$\varphi_{BA}(t) = \varphi_{xx}(t) = \varphi(t)$

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \qquad \dot{p} = \frac{i}{\hbar}[H,p] = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega_0^2 x \qquad [p,x] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\ddot{x} = -\omega_0^2 x$$

$$x(t) = x(0)\cos(\omega_0 t) + \frac{p(0)}{m\omega_0}\sin(\omega_0 t)$$

Schrödinger kép operátorai

$$[x(t), x(0)] = \frac{[p(0), x(0)]}{m w_0} \underset{\longleftarrow}{\sin(w_0 t)} \quad \frac{\hbar}{i}$$

$$\varphi(t) = \frac{\sin(w_0 t)}{m w_0}$$

(közönséges értelemben, disztribúcióként -tól lehetne!)

Fourier-trafó: $\int_0^\infty \frac{\sin(w_0 t)}{m w_0} e^{iwt}\, dt$ nincs értelme (oszcillál)

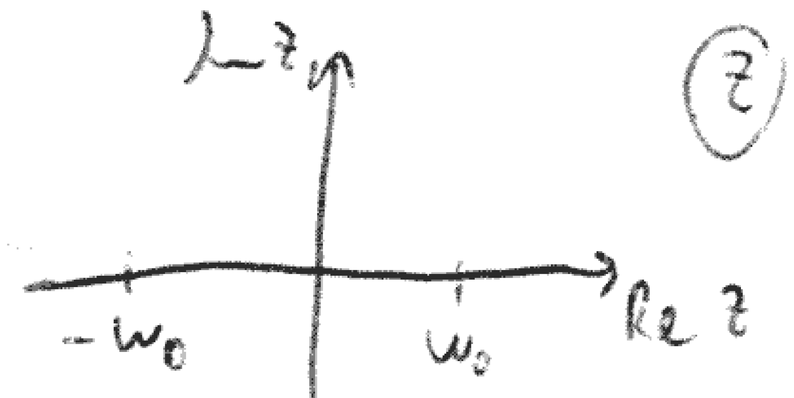
Csak $\operatorname{Im} z > 0$ félsíkon létezik a fourier transzformáltja

$$\int_0^\infty \frac{\sin(w_0 t)}{m w_0} e^{izt}\, dt = \frac{1}{m w_0} \int_0^\infty \frac{1}{2i}\left(e^{iw_0 t} - e^{-iw_0 t}\right) e^{izt}\, dt =$$

$$= \frac{1}{2imw_0}\left[\frac{e^{i(w_0+z)t}}{i(w_0+z)} - \frac{e^{i(-w_0+z)t}}{i(-w_0+z)}\right]_0^\infty = \frac{1}{2imw_0}\left(+\frac{1}{i(z-w_0)} - \frac{1}{i(z+w_0)}\right) =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2mw_0}\left(-\frac{1}{z-w_0} + \frac{1}{z+w_0}\right)}_{\text{értelmes az egész } z\text{-síkon}} = \chi(z) \leftarrow \frac{\sin(w_0 t)}{m w_0} \text{ Fourier transzformáltja a } \operatorname{Im} z > 0\text{-n}$$

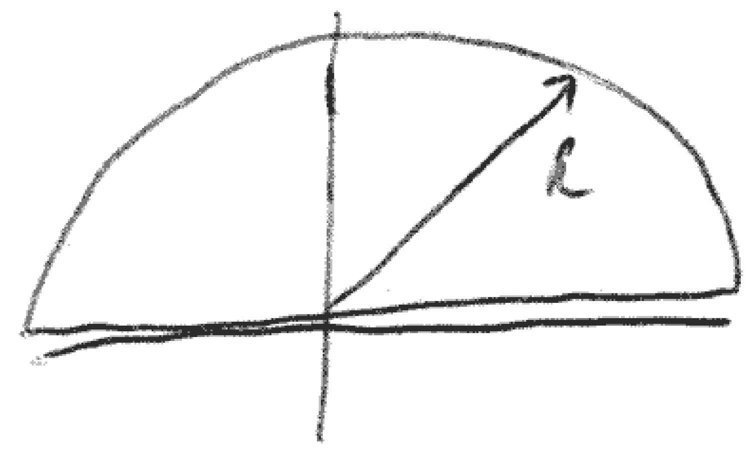
meromorf fv (pólusai vannak); pólusai $z = \pm w_0$



visszatranszformálás:

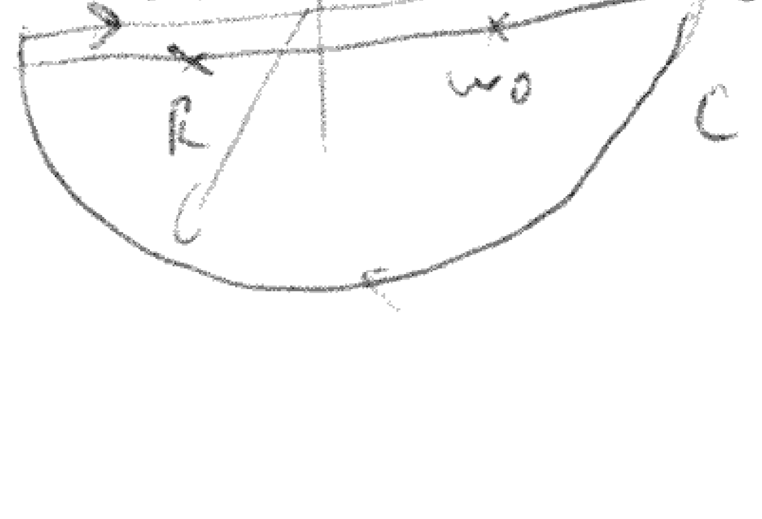
$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} dz\, \chi(z)\, e^{-izt} =$$

$t < 0$: $e^{-izt} = e^{-i\operatorname{Re} z\, t}\, \underset{|z|\to\infty,\ \operatorname{Im} z \to \infty}{e^{\operatorname{Im} z\, t} \longrightarrow} 0$, ha $t<0$ $\Rightarrow$



$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} dz\, \chi(z)\, e^{-izt} = \begin{cases} \\ 0, \text{ ha } t<0 \end{cases}$$

$t > 0$ $\operatorname{Im} z < 0$



$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} dz\, \chi(z)\, e^{-izt} = \frac{1}{2\pi}\oint_C \chi(z)\, e^{-izt}\, dz = -\frac{2\pi i}{2\pi}\left(\frac{-1}{2mw_0} e^{-iw_0 t} + \left(+\frac{1}{2mw_0}\right) e^{iw_0 t}\right)$$

$$= \frac{1}{2imw_0}\left(e^{iw_0 t} - e^{-iw_0 t}\right)$$

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}\big(B(t)A - AB(t)\big)\right) = \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle n|\frac{e^{-\beta H}}{Z}B(t)A - AB(t)|n\rangle = \%$$

$H\phi_n = E_n\phi_n$

$\tilde{A} \to (\varphi_n, A\varphi_m) = \langle n|A|m\rangle = A_{nm}$

$$\% = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\Big(\langle n|B(t)|m\rangle\langle m|A|n\rangle - \langle n|A|m\rangle\langle m|B(t)|n\rangle\Big) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\underbrace{\langle n|e^{+\frac{i}{\hbar}Ht}Be^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|m\rangle}_{\langle n|B|m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}\,e^{+\frac{i}{\hbar}E_n t}}\langle m|A|n\rangle$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle e^{-i\omega_{mn}t}$$

(általában ez végtelen összeg, ha oszcillátornál 2 tagra redukálódik)

Fourier-trafó: $\displaystyle\int_0^\infty e^{-i\omega_{mn}t}e^{izt}\,dt = \left[\frac{e^{i(z-\omega_{mn})t}}{i(z-\omega_{mn})}\right]_0^\infty = \frac{i}{z-\omega_{mn}}$

$$\int_0^\infty \chi_{BA}(t)e^{izt}\,dt = \int_0^\infty \varphi_{BA}(t)e^{izt} = -\frac{1}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\,\frac{\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle}{z-\omega_{mn}} = \chi_{BA}(z)$$

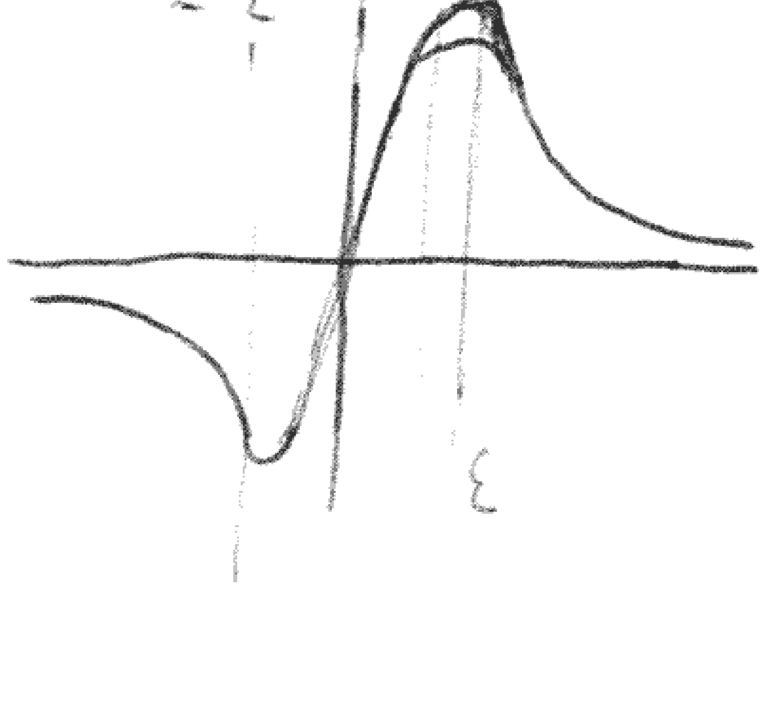
$(\mathrm{Im}\, z > 0)$

- Az egész z síkon értelmes
- meromorf fv, pólusok: $z = \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)$
- kiválasztási szabályok: $z = \omega_{mn}$ jelen van, ha $\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \neq 0$

Válaszfüggvény valós frekvenciákon:

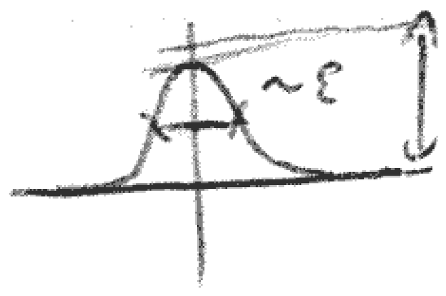
$\chi_{BA}(\underset{\text{valós}}{\omega}) = \lim_{\varepsilon\to 0}\chi_{BA}(\omega + i\varepsilon) = ?$

$$\frac{1}{x\pm i\varepsilon} = \frac{x \mp i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \underbrace{\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}}_{P\frac{1}{x}} \mp i\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$$



$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}\frac{1}{x} f(x)\,dx = \left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{f(x)}{x}\,dx + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{f(x)}{x}\,dx\right)_{\varepsilon\to 0}$$

$$\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} \pi\delta(x)$$



$\frac{1}{\varepsilon}$ Lorentz görbe

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \begin{cases} \infty & x=0 \\ 0 & x\neq 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\varepsilon} \frac{1}{1+\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{1}{1+s^2} = \left[\operatorname{arctg} s\right]_{-\infty}^{\infty} = \pi$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \chi_{BA}(\omega+i\varepsilon) = -\frac{1}{\hbar}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z} \underbrace{\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle}\left(\mathcal{P}\frac{1}{\omega-\omega_{mn}} - i\pi\delta(\omega-\omega_{mn})\right)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \chi_{BA}(\omega+i\varepsilon) = \chi'_{BA}(\omega) + i\,\chi''_{BA}(\omega)$$

χ'_{BA}: $\mathcal{P}$ tagok χ''_{BA}: δ tagok

lehet komplex
általában nem $\mathrm{Re}\,\chi_{BA}(\omega)$ és $\mathrm{Im}\,\chi_{BA}(\omega)$ szétbontás!

de pl: $B=A$ $\langle n|A|m\rangle\langle m|A|n\rangle = |\langle n|A|m\rangle|^2$ ilyenkor az!

Ha B megmaradó mennyiség ($[B,H]=0$) $B(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = B$

akkor $[B(t),A] = [B,A]$

$$\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}(BA-AB)\right) = 0$$

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}AB\right) = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}BA\right)$$

Megmaradó mennyiségeknek nincs lineáris válaszuk, először négyzetes rendben változnak (δH hatására $[H',B]\neq 0$) → változhatnak

pl: H egyensúlyi átlag
$$\langle H\rangle_t - \langle H\rangle_0 \sim \mathcal{O}(f^2)$$

nem adiabatikus válaszfv $\chi_{BA}(t)$

Izoterm statikus válasz

$H' = H - Af$ (f időtől független) $A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$

$$\langle B\rangle = \chi^T_{BA} f \qquad \chi^T_{BA} = \int_0^{\beta} \langle A(\tau)B\rangle\,d\tau$$

egyensúlyi átlag H'-vel

$$\chi^T_{BA} = \frac{\langle BA\rangle}{k_B T}$$

Ha $[B,H]=0$

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\frac{1}{Z} e^{\tau H} A e^{-\tau H} B\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}AB\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z}BA\right)$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

3. előadás (3)

$$\langle H\rangle_t - \langle H\rangle_0 = \mathcal{O}(f^2)$$

$$H' = H - A f(t)$$

$$\frac{d\langle H\rangle_t}{dt} = \mathrm{Tr}(\dot\varrho(t) H) = \%$$

$$\varrho(t) = U(t,t_0)\,\varrho_0\, U^+(t,t_0) \qquad i\hbar \dot U = H' U$$

$$i\hbar\dot\varrho = [H',\varrho]$$

$$\% = -\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\big((H'\varrho - \varrho H')H\big) = -\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\Big(\varrho\overbrace{(HH' - H'H)}^{-(HA-AH)f}\Big) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}(\varrho[H,A])f =$$

$$= \mathrm{Tr}(\varrho(t)\cdot \dot A(t))\, f(t)$$

$$W := \frac{d}{dt}\langle H\rangle_t = \langle \dot A(t)\rangle f(t)$$ külső zavar teljesítménye

teljesítmény elnyelési erő (elm. oszcillátornál pl.)

Lineáris válasz közelítésben, monokromatikus zavar:

$$f(t) = f_\omega \cos(\omega t) \overset{\text{valós}}{=} \frac{f_\omega}{2}\left(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}\right)$$

$$\langle A\rangle_t = \frac{f_\omega}{2}\left(\chi(\omega)e^{-i\omega t} + \chi(-\omega)e^{i\omega t}\right)$$

$$\langle \dot A\rangle_t = \frac{f_\omega}{2}\left(-i\omega\chi(\omega)e^{-i\omega t} + i\omega\chi(-\omega)e^{i\omega t}\right)$$

$$\langle \dot A\rangle f(t) = \left(\frac{f_\omega}{2}\right)^2\left[i\omega\chi(-\omega) - i\omega\chi(\omega) - i\omega\chi(\omega)e^{-2i\omega t} + i\omega\chi(-\omega)e^{2i\omega t}\right]$$

$$\overline{W} = \left(\frac{f_\omega}{2}\right)^2(-i\omega)\left(\chi(\omega) - \chi(-\omega)\right) = \frac{f_\omega^2}{2}\,\omega\,\mathrm{Im}\,\chi(\omega)$$ (disszipáció...)

időátlag (1 periódusra) $\qquad \chi(\omega) - \chi^*(\omega) = 2i\,\mathrm{Im}\,\chi(\omega) \qquad \chi_{AA}(\omega) \qquad (f_{eff}^2)$

$\mathrm{Im} \leftarrow$ (mert maga az operátor (AA))

$$\chi_{AA}(\omega) = \underset{P\ldots}{\overset{\mathrm{Re}}{\chi'_{AA}(\omega)}} + i\,\underset{\delta(\ldots)}{\chi''_{AA}(\omega)}$$

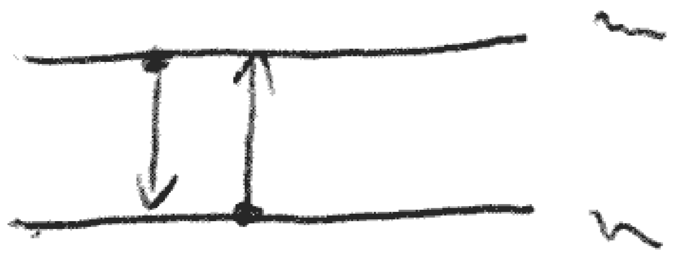
$$\overline{W} = \underbrace{\frac{f_\omega^2}{2}\,\omega\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle n|A|m\rangle|^2\,\frac{\pi}{\hbar}\,\delta(\omega - \omega_{mn})} \rightarrow \chi''_{AA} \qquad \omega = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

$$\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)(E_m - E_n) \geq 0 \qquad \text{(energiát nyel el)}$$

$$\overline{W} = \sum_{nm} \left(\frac{e^{-\beta E_n}}{Z} - \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\right) \cdot \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{f\omega}{2}\right)^2 |\langle n|A|m\rangle|^2 \,\delta\left(\hbar\omega - (E_m - E_n)\right)\cdot(E_m - E_n)$$

Fermi-féle aranyszabály (átmeneti valószínűség)

(várható energia elnyelés)



(átmeneti valószínűségekkel átlagolt várható gerjesztési energia)

B, A operátorok korrelációs függvényei:

ezekből 2-t ismerve a többi kiszámolható

$$S_{BA}(t) = \langle B(t) A(0) \rangle$$

$$\tilde{S}_{BA}(t) = \langle A(0) B(t) \rangle$$

$$C_{BA}(t) = \frac{1}{2}\langle B(t) A(0) + A(0) B(t) \rangle$$

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle B(t) A(0) - A(0) B(t) \rangle$$

<u>Energiaábrázolás:</u>

$$S_{BA}(t) = \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} B(t) A(0)\right) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-i\omega_{mn} t}$$

$$\tilde{S}_{BA}(t) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle e^{-i\omega_{nm} t}$$

<u>Fourier-tr:</u>

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \underset{\uparrow}{=} \underbrace{\int_{-\infty}^{0} dt\, e^{i\omega t} e^{\varepsilon t}}_{t := -t'} + \int_0^{\infty} dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} = 2\,\mathrm{Re}\left[\int_0^{\infty} dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t}\right] = \%$$

regularizálunk (regularizáció)

$$\int_0^{\infty} dt'\, e^{-i\omega t'} e^{-\varepsilon t'} = \left(\int_0^{\infty} dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t}\right)^*$$

$$\% = 2\,\mathrm{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon - i\omega}\right] = 2\,\mathrm{Re}\left(\frac{\varepsilon + i\omega}{\omega^2 + \varepsilon^2}\right) = 2\frac{\varepsilon}{\omega^2 + \varepsilon^2} \underset{\varepsilon \to 0}{=} 2\pi\,\delta(\omega)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} e^{-i\omega_{mn} t}\, dt = 2\pi\,\delta(\omega - \omega_{mn})$$

$$S_{BA}(\omega) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \cdot 2\pi\,\delta(\omega-\omega_{mn})$$

$$\tilde{S}_{BA}(\omega) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\, 2\pi\,\delta(\omega-\omega_{mn})$$

$$e^{-\beta E_m} = \underbrace{e^{-\beta E_n} e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$= e^{-\beta E_n} \cdot e^{-\beta(E_m-E_n)} = e^{-\beta E_n} e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}$$

$$\boxed{\tilde{S}_{BA}(\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S_{BA}(\omega)}$$

$$C_{BA}(\omega) = \frac{1}{2}\left(S_{BA}(\omega) + \tilde{S}_{BA}(\omega)\right) = \frac{1}{2}\left(1+e^{-\beta\hbar\omega}\right) S_{BA}(\omega)$$

$$\varphi_{BA}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\left(S_{BA}(\omega) - \tilde{S}_{BA}(\omega)\right) = \frac{i}{\hbar}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right) S_{BA}(\omega)$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\varphi_{BA}(t) = \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega)$$

$$\varphi_{BA}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\sum_{nm} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\, 2\pi\,\delta(\omega-\omega_{mn}) =$$

$$= 2i\chi''_{BA}(\omega)$$ (előzőleg ár kiszámoltuk φ_{BA} fourier transformáltját)

$$\frac{C_{BA}(\omega)}{\chi''_{BA}(\omega)} = \frac{\frac{1}{2}\left(1+e^{-\beta\hbar\omega}\right)\cancel{S_{BA}(\omega)}}{\frac{1}{2i}\frac{i}{\hbar}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\cancel{S_{BA}(\omega)}}$$

Fluktuáció - disszipáció - tétel:

$$C_{BA}(\omega) = \hbar\,\underbrace{\frac{\left(1+e^{-\beta\hbar\omega}\right)}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}_{\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\,\chi''_{BA}(\omega)$$

$$\boxed{C_{BA}(\omega) = \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\chi''_{BA}(\omega)}$$

$$C_{AA}(\omega) = \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\underbrace{\mathrm{Im}\,\chi_{AA}(\omega)}_{\chi''_{AA}(\omega)}$$

fluktuáció

disszipáció

időtükrözés: $t \to -t$

$A \to \varepsilon_A A$ $\qquad \varepsilon_A = 1$ vagy -1

időtükrözési szimmetria: $\langle B(t)A(0)\rangle = \varepsilon_B \varepsilon_A \langle A(0)B(-t)\rangle = \varepsilon_B\varepsilon_A \langle A(t)B(0)\rangle$

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\left(\langle B(t)A(0)\rangle - \langle A(0)B(t)\rangle\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\langle A(0)B(-t)\rangle - \langle B(-t)A(0)\rangle\right)\varepsilon_B\varepsilon_A =$$

$$= \frac{i\,\varepsilon_B\varepsilon_A}{\hbar}\left(\langle A(t)B(0)\rangle - \langle B(0)A(t)\rangle\right)$$

$$\underbrace{\varphi_{BA}(t) = -\varepsilon_A\varepsilon_B\,\varphi_{BA}(-t)} = \varepsilon_B\varepsilon_A\,\varphi_{AB}(t)$$

$$\chi_{BA}(z) = \varepsilon_B\varepsilon_A\,\chi_{AB}(z)$$

$$\cancel{\chi_{BA}(z) = \int_0^\infty dt\, e^{izt}\varphi_{BA}}$$

$$\varphi_{BA}(\omega) = \underbrace{\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\varphi_{BA}(t)}_{\chi_{BA}(\omega)} + \underbrace{\int_{-\infty}^0 dt\, e^{i\omega t}\varphi_{BA}(t)}_{t:=-t'\ \int_0^\infty dt'\, e^{-i\omega t'}\varphi_{BA}(-t') =}$$

$$= \int_0^\infty dt'\, e^{-i\omega t}\left(-\varepsilon_A\varepsilon_B\varphi_{BA}(t)\right) =$$

$$= -\varepsilon_A\varepsilon_B\underbrace{\chi_{BA}(-\omega)}_{\chi^*_{BA}}$$

$\varphi_{BA}(\omega) = 2i\chi''_{BA}(\omega)$

$$\varphi_{BA}(\omega) = \chi_{BA}(\omega) - \varepsilon_A\varepsilon_B\,\chi^*_{BA}(\omega) = \begin{cases} 2i\,\mathrm{Im}\,\chi_{BA}(\omega) & \text{, ha } \varepsilon_A\varepsilon_B = 1 \\ 2\,\mathrm{Re}\,\chi_{BA}(\omega) & \text{, ha } \varepsilon_A\varepsilon_B = -1 \end{cases}$$

$$\varphi\ \chi''_{BA}(\omega) = \begin{cases} \mathrm{Im}\,\chi_{BA}(\omega) & ,\ \varepsilon_A\varepsilon_B = 1 \\ \frac{1}{i}\mathrm{Re}\,\chi_{BA}(\omega) & ,\ \varepsilon_A\varepsilon_B = -1 \end{cases}$$

$C_{BA}(\omega) = \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\cdot \mathrm{Im}\,\chi_{BA}(\omega)$ (ha $\varepsilon_A\varepsilon_B = 1$) (páros t-) (valós)

$C_{BA}(\omega) = \hbar\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\frac{1}{i}\mathrm{Re}\,\chi_{BA}(\omega)$ (ha $\varepsilon_A\varepsilon_B = -1$) (páratlan t-) (képzetes)

Klasszikus határeset: ($\hbar\omega \ll k_BT$)

$\mathrm{cth}\, x \simeq \frac{1}{x}$ ha $x \ll 1$

$$\hbar\, \mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \simeq \hbar \frac{2}{\beta\hbar\omega} = \frac{2k_BT}{\omega} \qquad C_{BA}(\omega) = \frac{2k_BT}{\omega}\chi''_{BA}(\omega)$$

ha $\hbar\omega \ll k_BT$ a domináns ω tartomány $C_{BA}(\omega)$-ban

$$C_{BA}(\omega) = \frac{2k_BT}{\omega}\chi''_{BA}(\omega) = \frac{2k_BT}{\omega}\frac{\varphi_{BA}(\omega)}{2i} = \frac{k_BT}{i\omega}\varphi_{BA}(\omega)$$

$$\varphi_{BA}(\omega) = \frac{i\omega\, C_{BA}(\omega)}{k_BT}$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi_{BA}(t) = -\frac{1}{k_BT}\frac{\partial C_{BA}(t)}{\partial t} = -\frac{1}{k_BT}\langle \dot{B}(t) A(0)\rangle$$

$$\chi_{BA}(t) = \begin{cases} -\frac{1}{k_BT}\frac{\partial C_{BA}(t)}{\partial t} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

$$\langle B(t) A(0)\rangle = \langle B(0) A(-t)\rangle$$

$$\langle \dot{B}(t) A(0)\rangle = -\langle B(0)\dot{A}(t)\rangle = -\langle B(t)\dot{A}(0)\rangle$$

$$\varphi_{BA} = \frac{1}{k_BT}\langle B(t)\dot{A}(0)\rangle$$

Összegszabályok (kis t viselkedés)

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle [B(t), A(0)]\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \underbrace{\varphi_{BA}(\omega)}_{2i\chi''_{BA}(\omega)} e^{-i\omega t}$$

$t = 0$:

$$\varphi_{BA}(t=0) = \frac{i}{\hbar}\langle [B, A]\rangle = \frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\chi''_{BA}(\omega)\, d\omega$$

$$\frac{1}{\hbar}\langle [B, A]\rangle = \frac{1}{\pi}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \frac{\pi}{\hbar}$$

$$\langle [B, A]\rangle = \sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle$$

$$\dot{\varphi}_{BA}(t=0) = \frac{i}{\hbar}\langle [\dot{B}, A]\rangle = \frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(-i\omega)\,\chi''_{BA}(\omega)\, d\omega$$

[illegible] $\qquad -i\omega$s $\qquad \Leftarrow$ kontroll

(további frekvencia intervallumok lehetnek-e?)

$$\chi_{BA}(z) = \int_0^\infty dt\, e^{izt}\, \varphi_{BA}(t) = \underbrace{\left[\frac{e^{izt}}{iz}\varphi_{BA}(t)\right]_0^\infty}_{-\frac{\varphi_{BA}(t=0)}{iz}} - \underbrace{\frac{1}{iz}\int_0^\infty dt\, e^{izt}\, \dot{\varphi}_{BA}(t)}_{\text{ext is parc. int. ..}} = \ldots$$

$(\mathrm{Im}\, z > 0)$

asimptotikus sor $(|z| \gg 1)$

$$= -\frac{\varphi_{BA}(0)}{iz} + \frac{\dot{\varphi}_{BA}(0)}{(iz)^2} + \ldots$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

4. előadás (3)

Megjegyzés:

$$\chi_{BA}(z) = -\frac{1}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\frac{1}{z-\omega_{mn}}$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{mn}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\,\pi\,\delta(\omega-\omega_{mn})$$

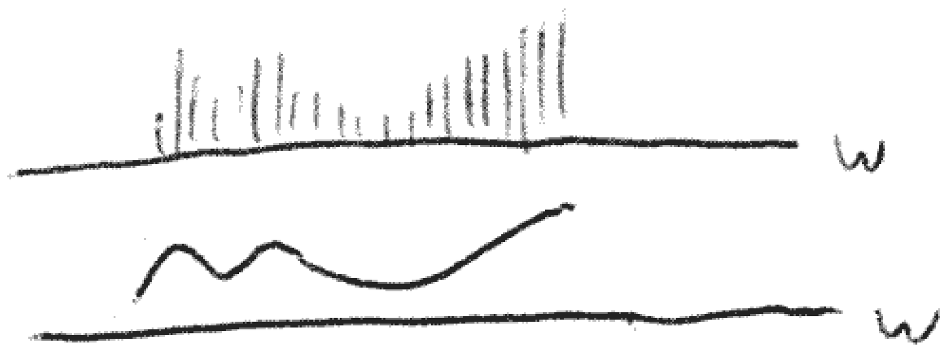
$$\boxed{-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\,\frac{\chi''_{BA}(\omega')}{z-\omega'} = \chi_{BA}(z)}$$

$\chi_{BA}(z)$: Fourier transzformáltja $\chi_{BA}(t)$-nek $\operatorname{Im} z > 0$-n

itteni egész zárójelben, megegyezik ...

Analitikusan vált Fourier transzformáltja $\operatorname{Im} z < 0$

Kvázifolytonos gerjesztési spektrum



χ''_{BA} "simítva": $\overline{\chi}''_{BA}(\omega)$

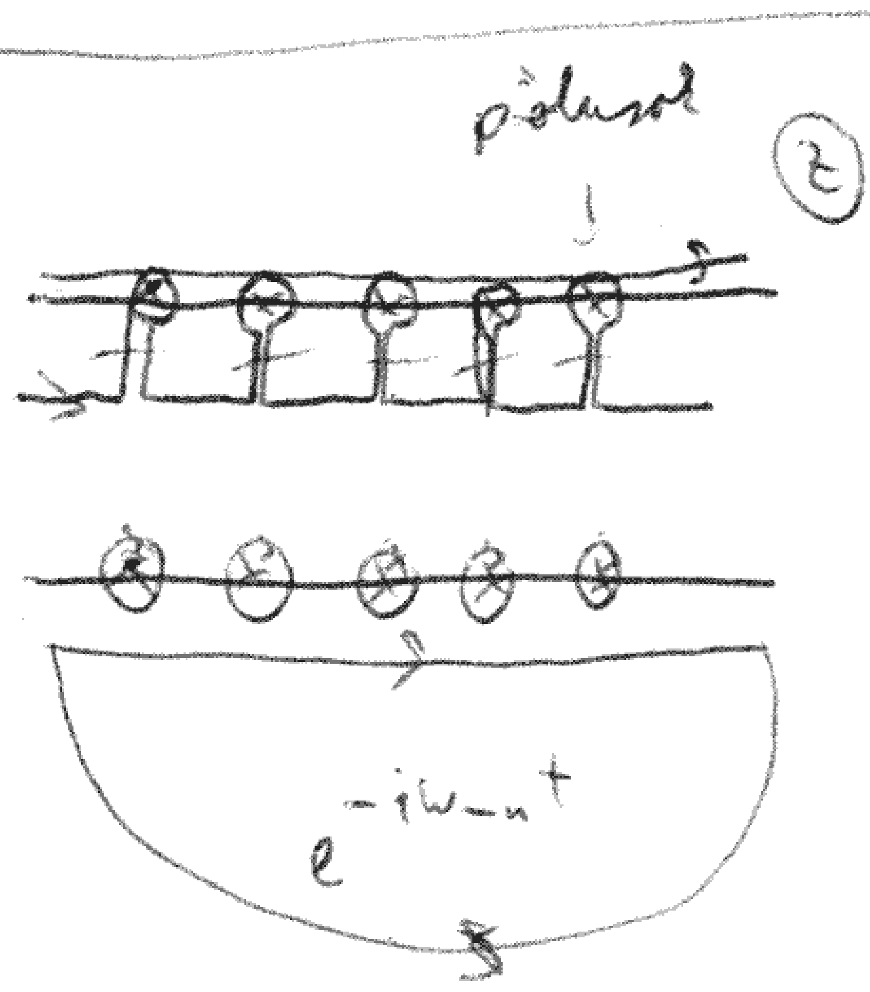
ezt látjuk kísérletileg

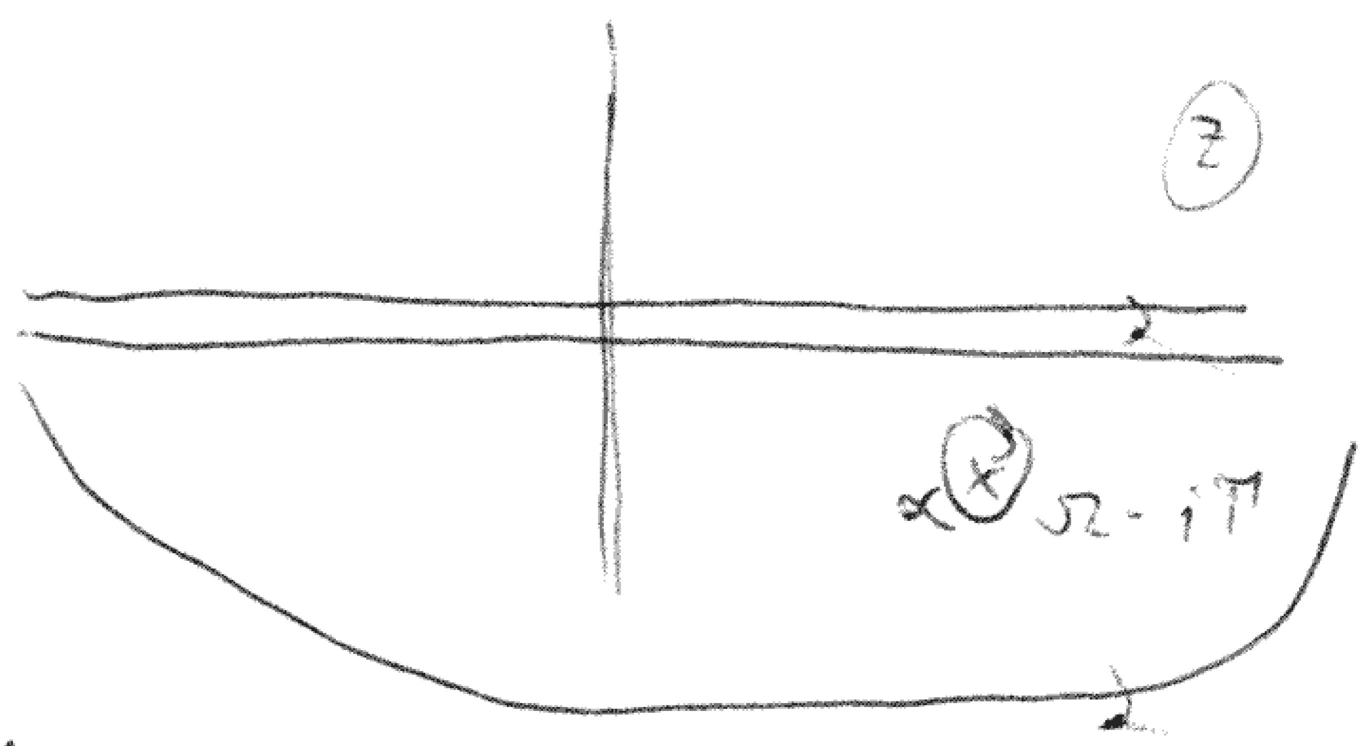
$$\overline{\chi}''_{BA}(\omega)\,\Delta\omega = \int_{\omega}^{\omega+\delta\omega}\chi''_{BA}(\omega')\,d\omega'$$

$$\chi_{BA}(z) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\,\frac{\overline{\chi}''_{BA}(\omega')}{z-\omega'}$$

$\operatorname{Im} z > 0$: $\chi_{BA}(t)$ Fourier transzformáltja

$$\chi_{BA}(z=\omega+i\varepsilon) = -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\,\frac{\overline{\chi}''_{BA}(\omega')}{\omega-\omega'} \underbrace{\pm i\pi\,\overline{\chi}''_{BA}(\omega)}_{\text{ugrás a valós tengelyen (vágás)}}$$





Pólus járulék

Pólus járuléka: $\frac{1}{2\pi}\oint_{\alpha} dz\, e^{-izt} \frac{R}{z-(\Omega - i\Gamma)}$

$-2\pi i \frac{1}{2\pi} R e^{-i(\Omega - i\Gamma)t} = -iR e^{-i\Omega t} e^{-\Gamma t}$ ← véges élettartamú elemi gerjesztés

($\hbar\Omega$ energia, $\frac{1}{\Gamma}$ élettartam)

Példa

Elektromos vezetés e töltésű részecskék

$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \sum_{i=1}^{N} e(\underline{r}_i \underline{E})$

$\underline{E}(t)$ homogén elektromos térben
↓
potenciálja: $-e(\underline{r}\,\underline{E})$

feltesszük, hogy nincs mágneses tér

$\underline{P} = e\sum_i \underline{r}_i$
polarizáció

$\underline{J} = e\sum_i \underline{v}_i = e\sum_i \frac{\underline{p}_i}{m} = \dot{\underline{P}}$
elektromos áram

$B \to \underline{J}$
$A \to \underline{P}$
$f \to \underline{E}(t)$

korlátok: – visszahatás nincs
– $\lambda \gg L$ ← ellenőr homogén

λ: elektromos tér hullámhossza; L: rendszer mérete

izotróp rendszerben: $\langle \underline{P} \rangle \parallel \underline{E}$
$\langle \underline{J} \rangle \parallel \underline{E}$

⇒ elég skalárokat írni!
(csak tér irányú komponens van!)

$\langle J \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \varphi_{JP}(t-t')E(t')\,dt'$

$\chi_{JP}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle [J(t), P(0)] \rangle \qquad (t>0)$

áramsűrűség: $j = \frac{J}{V}$ $\qquad \langle j \rangle_t = \frac{1}{V}\int_{-\infty}^{t} \varphi_{jP}(t-t')E(t')\,dt' =$

$= \int_{-\infty}^{t} \sigma(t-t')E(t')\,dt'$

$\sigma(t) = \frac{1}{V}\chi_{JP}(t)$
↑
vezetőképesség

időtükrözés: $\varepsilon_J = -1$
$\varepsilon_P = 1$

$$\chi''_{JP}(\omega) = \frac{1}{i}\,\mathrm{Re}\,\chi_{JP}(\omega) = \frac{V}{i}\,\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$$

$E(t) = E_\omega \cos(\omega t)$

$$J = \dot{P} \Rightarrow \quad \chi_{JP}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle[\underset{\dot{P}(t)}{J(t)}, P(0)]\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\chi_{PP}(t)$$

$$\chi_{JP}(\omega) = -i\omega\,\chi_{PP}(\omega)$$

<u>disszipáció:</u> $$\bar{W} = \frac{E_\omega^2}{2}\omega\,\mathrm{Im}\,\chi_{PP}(\omega) = \frac{E_\omega^2}{2}\omega\,\chi''_{PP}(\omega) = \frac{E_\omega^2}{2}\frac{1}{(-i)}\chi''_{JP}(\omega) =$$

$$= V\frac{E_\omega^2}{2}\,\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)$$

<u>Összegszabály:</u> $$\varphi_{BA}(t=0) = \frac{i}{\hbar}\langle[B,A]\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_{BA}(\omega)\,d\omega = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}2i\,\chi''_{BA}(\omega)\,d\omega$$

jobb oldal:

$$\frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\chi''_{JP}(\omega)\,d\omega = \frac{V}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)\,d\omega$$

bal oldal:

$$\frac{i}{\hbar}\langle[e\sum_i\frac{p_i}{m}, e\sum_j x_j]\rangle = \frac{i}{\hbar}\frac{e^2}{m}\langle\sum_{ij}\overbrace{[p_i, x_j]}^{\delta_{ij}\frac{\hbar}{i}}\rangle = \frac{e^2}{m}\cdot N$$

$n := \frac{N}{V}$

$$\boxed{\frac{ne^2}{m} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)\,d\omega}$$

klasszikus határeset (közelítés) } → vezetőképesség
relaxációs idő közelítés

<u>Klasszikus közelítés:</u> $$\varphi_{JP}(t) = -\frac{1}{k_BT}\langle J(t)\,\dot{P}(0)\rangle = \frac{1}{k_BT}\langle J(t)\,J(0)\rangle$$

<u>relaxációs idő közelítés:</u> $|t| \to \infty$ $\quad \langle J(t), J(0)\rangle \to 0$

$$\langle J(t)\,J(0)\rangle = \langle J^2\rangle\, e^{-\frac{|t|}{\tau}}$$

$$\langle J^2\rangle = \langle(\sum_i e v_i)(\sum_j e v_j)\rangle = e^2\sum_{ij}\underset{\text{Maxwell-sebességeloszlás}}{\langle v_i v_j\rangle} = Ne^2\frac{k_BT}{m}$$

$$\underbrace{\ }\ \delta_{ij}\langle v^2\rangle = \delta_{ij}\frac{k_BT}{m}$$

$$\langle J(t)\,J(0)\rangle = \frac{Ne^2}{m}k_BT\,e^{-\frac{|t|}{\tau}}$$

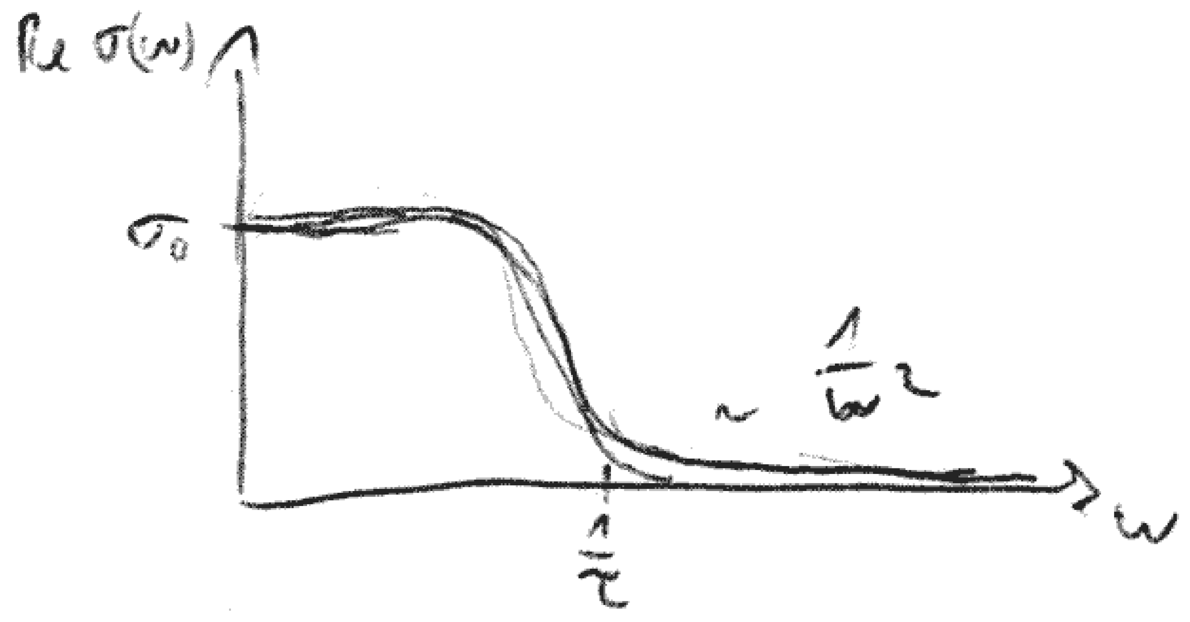
$$\sigma(t) = \frac{1}{V}\varphi_{JP}(t) = \frac{1}{V k_B T}\langle J(t)\, J(0)\rangle = \frac{n e^2}{m} e^{-\frac{t}{\tau}}$$
$(t>0)$

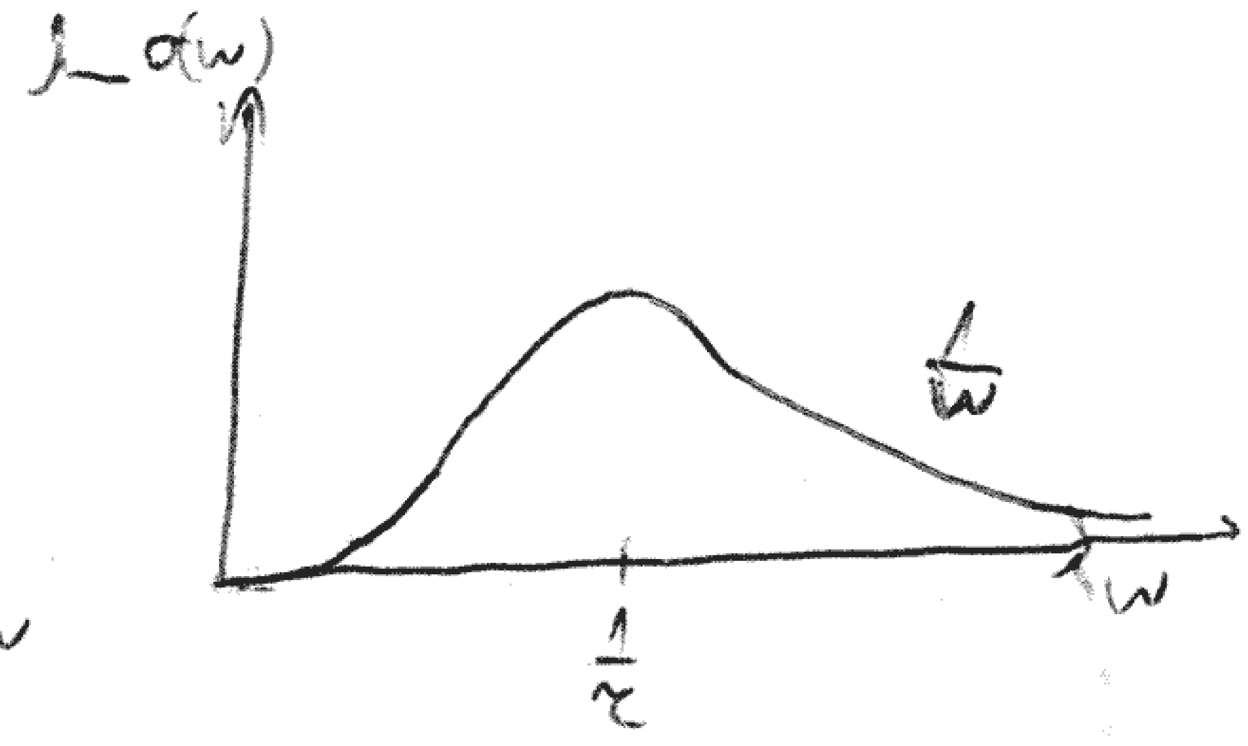
$$\sigma(\omega) = \underbrace{\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} e^{-\frac{t}{\tau}}}_{\frac{1}{\frac{1}{\tau} - i\omega} = \frac{\tau}{1-i\omega\tau}} \frac{n e^2}{m} = \frac{n e^2}{m}\tau \underbrace{\frac{1}{1-i\omega\tau}}_{\frac{1+i\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}}$$

(Drude modell eredménye)

$\underline{\omega = 0}$ $\quad \sigma_0 = \frac{n e^2}{m}\tau$

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1}{1+\omega^2\tau^2}$$





$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Re}\,\sigma(\omega)\, d\omega = \frac{n e^2 \tau}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{1+\omega^2\tau^2} = \frac{n e^2}{m}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{1}{1+s^2}}_{[\arctg s]_{-\infty}^{\infty} = \pi} = \frac{\pi n e^2}{m}$$

$s = \omega\tau$

nem n^*, mert a polarizációs áramot nem veszi figyelembe (csak a törzsek)

$\underline{\text{Lokális operátorok: } A(\underline{r})}$

pl. sűrűség: $\rho(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$ $\qquad \rho = \psi^\dagger(\underline{r})\psi(\underline{r})$

áramsűrűség: $\underline{j}(\underline{r}) = \frac{1}{2}\sum_i \left(\frac{\underline{p}_i}{m}\delta(\underline{r} - \underline{r}_i) + \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\frac{\underline{p}_i}{m}\right)$

$\sum_i \underline{v}_i \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$

$\underline{\text{Fourier-transzformált:}}$ $\hat{A}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\underline{r}}\hat{A}(\underline{q})$

$$\hat{A}_q = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3r\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\hat{A}(\underline{r})$$

pl: $\hat{\rho}_q = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3r\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\sum_{i=1}^{N}\delta(\underline{r} - \underline{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{i=1}^{N} e^{-i\underline{q}\underline{r}_i}$

$$\hat{\underline{j}}_q = \frac{1}{2\sqrt{V}}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\underline{p}_i}{m} e^{-i\underline{q}\underline{r}_i} + e^{-i\underline{q}\underline{r}_i}\frac{\underline{p}_i}{m}\right)$$

$$\dot{\varrho}_q = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \varrho_q] = \frac{i}{\hbar}\left[\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}, \varrho_q\right] = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{V}}(-iq)\sum_i\left(\frac{p_i}{m}e^{-iqr_i} + e^{-iqr_i}\frac{p_i}{m}\right) = -iq\,\underline{j}_q$$

$$\left[\sum_i \frac{p_i^2}{2m}, \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{j} e^{-iqr_j}\right] = \sum_i\left[\frac{p_i^2}{2m}, e^{-iqr_i}\right]\frac{1}{\sqrt{V}} \qquad \left(p = \frac{\hbar}{i}\nabla\right)$$

$$\frac{p^2}{2m}e^{-iqr} - e^{-iqr}\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\cancel{p e^{-iqr}p} + p(-iq)e^{-iqr}\frac{\hbar}{i} - \cancel{p e^{-iqr}p} + \frac{\hbar}{i}(-iq)e^{-iqr}p\right)$$

$$[p, g(r)] = \frac{\hbar}{i}\nabla g(r)$$

$$[p, e^{-iqr}] = \frac{\hbar}{i}(-iq)e^{-iqr}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}(-iq)\left(p\,e^{-iqr} + e^{-iqr}p\right)$$

$$\dot{\varrho}(r) = -\nabla \underline{j}(r) \qquad (\dot{\varrho}_q = -iq\,\underline{j}_q)$$

Transzlációs invariancia következménye!

$$\langle A(r)\rangle = \langle A(r+a)\rangle = \langle A(r=0)\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_q e^{iqr}\langle A_q\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_q e^{iqr}e^{iqa}\langle A_q\rangle \Rightarrow \langle A_q\rangle = e^{iqa}\langle A_q\rangle$$

tetszőleges a-ra $\Rightarrow$

$\Rightarrow \langle A_q\rangle = 0$, ha $q \neq 0$

$$\langle B(r)A(r')\rangle = \langle B(r+a)A(r'+a)\rangle = \langle B(r-r')A(r=0)\rangle$$

Fourier komponensekre!

$$\frac{1}{V}\sum_q\sum_{q'} e^{iqr}e^{iq'r'}\langle B_q A_{q'}\rangle = \frac{1}{V}\sum_q\sum_{q'}e^{iqr}e^{iq'r'}e^{i(q+q')a}\langle B_q A_{q'}\rangle$$

$$\langle B_q A_{q'}\rangle = e^{i(q+q')a}\langle B_q A_{q'}\rangle$$ tetszőleges a-ra $\Rightarrow$

$\langle B_q A_{q'}\rangle = 0$, ha $q+q' \neq 0$

$$\langle B_q A_{q'}\rangle = \delta_{q,-q'}\langle B_q A_{-q}\rangle$$

Nemegyensúlyi Statisztikus fizika

5. előadás (3)

Lokális operátorok: $A(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{irq} A_q$

Transzlációs szimmetrikus esetben: $\langle A(r) \rangle = \langle A(0) \rangle$

$$\langle B(r) A(r') \rangle = \langle B(r-r') A(0) \rangle$$

$$\langle B_q A_{q'} \rangle = \delta_{q',-q} \langle B_q A_{-q} \rangle$$

$$H' = H - \underbrace{\int d^3r\, A(r) f(r,t)}_{} = H - \sum_q A_q f_{-q}(t)$$

így zajt vezetünk be zavart

$$\langle B(r) \rangle_t = \langle B(r) \rangle_0 + \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{BA}(r-r', t-t') f(r', t')\, dt'$$

$$\varphi_{BA}(r,t) = \frac{i}{\hbar} \langle [B(r,t), A(0,0)] \rangle$$

r-től független

nincs összegzés q-ra, mert csak ekkor ad járulékot

$$\langle B_q \rangle_t = \langle B_q \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \varphi_{BA}(q, t-t') f_q(t')$$

$$\varphi_{BA}(q,t) = \frac{i}{\hbar} \langle [B_q(t), A_{-q}(0)] \rangle$$

$A(r) = A^+(r)$ önadjungált

$$\sum_q e^{-iqr} A_q^+ = \sum_q e^{iqr} A_q \quad \Rightarrow \quad \underline{A_q^+ = A_{-q}}$$

Külső zavar: külső potenciál

$$H' = H + \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \phi(r_i, t)}_{}$$

$$\int d^3r \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i)}_{\hat{\rho}(r)} \phi(r,t) = \int d^3r\, \hat{\rho}(r) \phi(r,t) = \%$$

$$\%_0 = \sum_q \hat{\rho}_q \phi_{-q}(t)$$

$$\langle \rho_q \rangle_t = \langle \rho_q \rangle_0 + \int_{-\infty}^{t} \varphi_{\rho\rho}(q, t-t')(-\phi_q(t))$$

csak a $q=0$ komponens nem $\emptyset$

$$\varphi_{\rho\rho} = \frac{i}{\hbar} \langle [\rho_q(t), \rho_{-q}(0)] \rangle$$

$$\varphi_{\rho\rho}(q\omega) = \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \underbrace{\langle n | \rho_q | m \rangle \langle m | \rho_{-q} | n \rangle}_{|\langle n | \rho_q | m \rangle|^2} 2\pi \delta(\omega - \omega_{mn})$$

$$\chi''_{\rho\rho}(q,\omega) = \frac{\varphi_{\rho\rho}}{2i}$$

$$S_{\rho\rho}(q,t) = \langle \rho_q(t) \rho_{-q}(0) \rangle$$

$$\tilde{S}(q,t) = \langle \rho_{-q}(0) \rho_q(t) \rangle = \langle \rho_{-q}(-t) \rho_q(0) \rangle = S(-q,-t)$$

$$\underline{\tilde{S}(q,\omega) = e^{\beta\hbar\omega} S(q,\omega) = S(-q,-\omega)}$$

eltolás inv.

$$\langle \rho(r,t)\, \rho(0,0) \rangle = \langle \rho(0,0)\, \rho(r,-t) \rangle = \langle \rho(-r,t)\, \rho(0,0) \rangle = S(-r,t)$$

$$S(r,t) = S(-r,t) \Rightarrow S(q,t) = S(-q,t)$$

$$\underline{S(q,\omega) = S(-q,\omega)}$$

$S(q,\omega) = \cancel{S(q,-\omega)}$

$$\varphi(q,\omega) = \frac{i}{\hbar}\left(S(q,\omega) - \tilde{S}(q,\omega)\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(S(q,\omega) - S(q,-\omega)\right) \quad \Rightarrow (\varphi \text{ páratlan fv})$$

Összegszabályok:

$$\frac{1}{2\pi}\int \varphi(q,\omega) e^{-i\omega t}\, d\omega = \varphi(q,t) \quad \Leftarrow \text{ebből és ezek deriváltjaiból}$$

(1) $\varphi(q,0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q,\omega)\, d\omega = 0$ (mert φ páratlan)

$$\hookrightarrow \frac{i}{\hbar}\langle [\rho_q, \rho_{-q}] \rangle = 0$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$$\dot\varphi(q,0) = \underbrace{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(-i\omega)\,\varphi(q,\omega)\,d\omega}_{\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,(S(q,\omega)-S(q,-\omega))\,\omega} = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} S(q,\omega)\,\omega\, d\omega$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,(-\omega)\,S(q,-\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\omega\, S(q,\omega) \quad *$$

$$\left[\dot\rho_q = -i(q J_q)\right]$$

$$\dot\varphi(q,0) = \frac{i}{\hbar}\langle[\dot\rho_q, \rho_{-q}]\rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(-iq)\,\langle[J_q, \rho_{-q}]\rangle$$

$$[qJ_q, \rho_{-q}] = \frac{1}{2V}\left(\sum_i\left(\frac{qp_i}{m}e^{-iqr_i} + e^{-iqr_i}\frac{qp_i}{m}\right)\sum_j e^{-iqr_j} - \right.$$

$$\left. - \sum_j e^{iqr_i}\sum_i\left(\frac{qp_i}{m}e^{-iqr_i} + e^{-iqr_i}\frac{qp_i}{m}\right)\right) =$$

$$= \frac{1}{2V}\sum_i\left[\cancel{\frac{qp_i}{m}e^{-iqr_i}}\,e^{iqr_i} + e^{-iqr_i}\frac{qp_i}{m}e^{iqr_i} - e^{iqr_i}\frac{qp_i}{m}e^{-iqr_i} - \cancel{e^{iqr_i}e^{-iqr_i}\frac{qp_i}{m}}\right]$$

$$\left(\cancel{e^{-iqr_i}e^{iqr_i}\frac{qp_i}{m}} + \frac{\hbar}{i}\frac{q(iq)}{m}\cancel{e^{-iqr_i}e^{iqr_i}}\right) - \left(\cancel{e^{iqr_i}e^{-iqr_i}}\cancel{\frac{qp_i}{m}} + \frac{\hbar}{i}\frac{q(-iq)}{m}\cancel{e^{iqr_i}e^{-iqr_i}}\right) =$$

$$= 2\frac{\hbar}{m}q^2$$

$$* = \frac{1}{2V}\,2\frac{\hbar}{m}q^2 N$$

$$\dot\varphi(q,0) = \frac{1}{\hbar}\langle[qJ_q, \rho_{-q}]\rangle = \frac{1}{\cancel{\hbar}}\frac{N}{V}\frac{\cancel{\hbar} q^2}{m}$$

$$\boxed{\frac{N}{V}\frac{\hbar q^2}{m} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} S(q,\omega)\,\omega\, d\omega} \leftarrow *$$

Ideális Fermi gáz ($\frac{1}{2}$ spin)

mágneses spinszuszceptibilitás (paramágneses)

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \, a^+_{k,\sigma} a_{k,\sigma} \qquad \sigma = \uparrow\downarrow$$

$$m(r) = \tilde{\mu}\left(\psi^+_\uparrow(r)\psi_\uparrow(r) - \psi^+_\downarrow(r)\psi_\downarrow(r)\right)$$

$\vec{\ }$mágnesezettség z komponense
sűrűség

$$\psi_\uparrow(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{iqr} a_{q\uparrow}$$

$$m_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \tilde{\mu} \int e^{-ikr} m(r)\, d^3r = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{\tilde{\mu}}{V} \sum_q \sum_{q'} \int e^{-iqr} e^{iq'r} e^{-ikr} \left(a^+_{q\uparrow} a_{q'\uparrow} - a^+_{q\downarrow} a_{q'\downarrow}\right) d^3r$$

$$\int e^{i(-k-q+q')r} d^3r = V \delta_{q', k+q}$$

$$m_k = \frac{\tilde{\mu}}{\sqrt{V}} \sum_q \left(a^+_{q\uparrow} a_{q+k\uparrow} - a^+_{q\downarrow} a_{q+k\downarrow}\right)$$

perturbáció:

$$-\int d^3r\, m(r) B(r,t) = -\sum_k m_k B_{-k}(t)$$

$$\chi(k,t) = \frac{i}{\hbar} \langle [m_k(t), m_{-k}(0)] \rangle$$

$$\langle m_k \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \chi(k, t-t') B_k(t') dt'$$

$$\dot{a}_{k,\sigma} = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, a_{k,\sigma}] = \frac{i}{\hbar}[\varepsilon_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}, a_{k\sigma}] = -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_k a_{k\sigma}$$

$$a^+_{k\sigma} \underbrace{a_{k\sigma} a_{k\sigma}}_{0} - \underbrace{a_{k\sigma} a^+_{k\sigma}}_{1 - a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}} a_{k\sigma} = -a_{k\sigma}$$

$$a_{k\sigma}(t) = a_{k\sigma} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}$$

$$a^+_{k\sigma}(t) = a^+_{k\sigma} e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}$$

$$m_k(t) = \frac{\tilde{\mu}}{V} \sum_q \left(a^+_{q\uparrow} a_{k+q\uparrow} - a^+_{q\downarrow} a_{k+q\downarrow}\right) \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_q t} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{k+q} t}}_{e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_q)t}}$$

$$\chi(k,t) = \frac{\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \sum_{q'} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_q)t} \left\langle \frac{i}{\hbar}\left[\left(a^+_{q\uparrow} a_{q+k\uparrow} - a^+_{q\downarrow} a_{q+k\downarrow}\right), a^+_{q'\uparrow} a_{q'-k\uparrow} - a^+_{q'\downarrow} a_{q'-k\downarrow}\right]\right\rangle$$

Nerovnovážná statistická fyzika

$$\chi(l,t) = \frac{\tilde{\mu}^2}{V} \sum_{q q'} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{l+q} - \varepsilon_q)t} \left\langle \frac{i}{\hbar}\left[a^+_{q\uparrow} a_{q+l\uparrow}, a^+_{q'\uparrow} a_{q'-l\uparrow}\right] + \frac{i}{\hbar}\left[a^+_{q\downarrow} a_{q+l\downarrow}, a^+_{q'\downarrow} a_{q'-l\downarrow}\right] \right\rangle$$

$$a^+_{q\uparrow} \underbrace{a_{q+l\uparrow} a^+_{q'\uparrow}}_{\delta_{q',q+l} - a^+_{q'\uparrow} a_{q+l\uparrow}} a_{q'-l\uparrow} - a^+_{q'\uparrow} \underbrace{a_{q'-l\uparrow} a^+_{q\uparrow}}_{\delta_{q,q'-l} - a^+_{q\uparrow} a_{q'-l\uparrow}} a_{q+l\uparrow} = \delta_{q',q+l}\, a^+_{q\uparrow} a_{q\uparrow} -$$

$$- a^+_{q'\uparrow} a_{q'\uparrow} \delta_{q,q'-l} - \left. \begin{array}{l} - a^+_{q\uparrow} a^+_{q'\uparrow} a_{q+l\uparrow} a_{q'-l\uparrow} + \\ + \underbrace{a^+_{q'\uparrow} a^+_{q\uparrow} a_{q'-l\uparrow} a_{q+l\uparrow}}_{(-a^+_{q\uparrow} a_{q'\uparrow})(-a_{q+l} a_{q-l})} \end{array} \right\} *$$

$$* = 0$$

$$\chi(l,t) = \frac{\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{l+q} - \varepsilon_q)t} \left\langle \frac{i}{\hbar}\left(a^+_{q\uparrow} a_{q\uparrow} - a^+_{q+l\uparrow} a_{q+l\uparrow} + a^+_{q\downarrow} a_{q\downarrow} - a^+_{l+q\downarrow} a_{l+q\downarrow} \right)\right\rangle$$

$$\langle a^+_{q\uparrow} a_{q\uparrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_q - \mu)} + 1} = f(\varepsilon_q)$$

$$\boxed{\chi(l,t) = \frac{2\tilde{\mu}^2}{V}\frac{i}{\hbar} \sum_q e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{l+q} - \varepsilon_q)t} \left(f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{l+q}) \right)}$$

Nemegyensúlyi Statisztikus fizika

$\boxed{\text{6. előadás}}$ (3)

Ideális fermi-gáz

Spin-szuszceptibilitás

$$\left(H = \sum_q \varepsilon_q a^+_{q\sigma} a_{q\sigma} \right)$$

$$\chi(k,t) = \frac{i}{\hbar} \frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)t} \left(f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q}) \right) \qquad (t>0)$$

$$\left(f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \right)$$

Fourier-tr:

$$\int_0^\infty e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)t} e^{izt}\, dt \underset{\mathrm{Im}\, z>0}{=} -\frac{1}{iz - \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)}$$

$$\boxed{\chi(k,z) = -\frac{1}{\hbar} \frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \frac{f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q})}{z - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)}}$$

(meromorf fv (pólusai valósak))

Ha: $k = 0$ $\quad \chi(k=0, z) = 0$ $\quad$ megmaradó mennyiség... (→ mágnesezettség)

valós frekvenciák határesete: $z = w + i\varepsilon \quad \varepsilon \to 0$

$$\chi(k,w) = -\frac{1}{\hbar} \frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \left(f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q}) \right) \cdot \left(\mathcal{P} \frac{1}{w - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)} - i\pi\, \delta\!\left(w - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)\right) \right)$$

sztatikus válasz: $w \to 0$

$$\mathrm{Im}\,(k, w=0) = 0$$

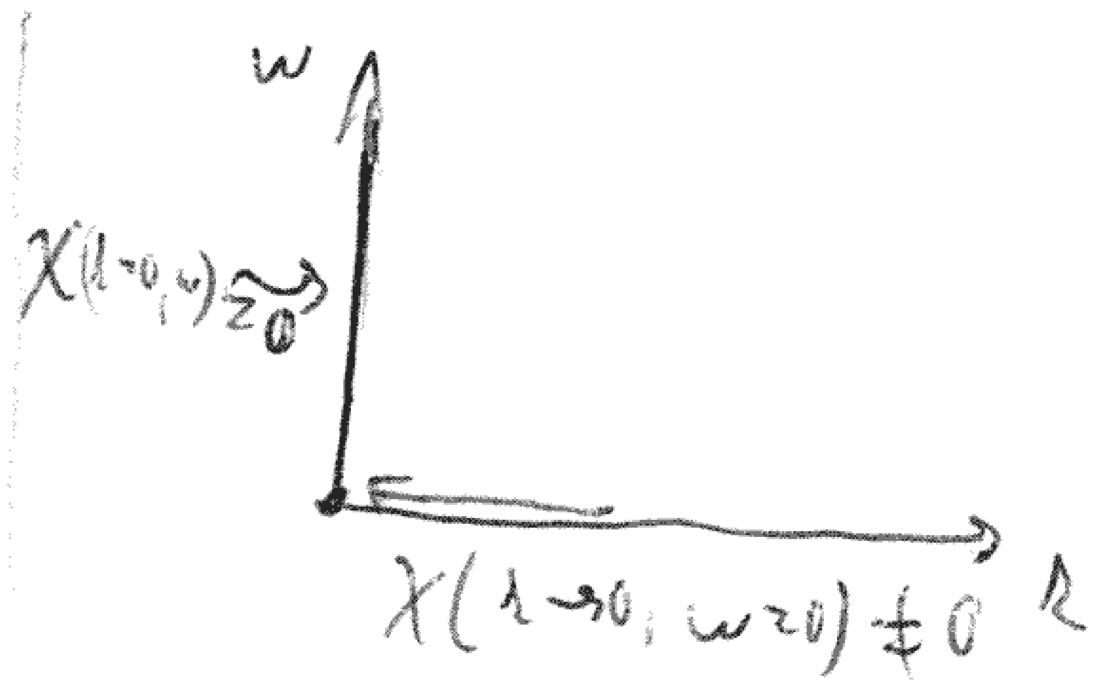
$$\delta\!\left(\frac{1}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q)\right) \to \varepsilon_{k+q} = \varepsilon_q \Rightarrow f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q}) = 0$$

$$\mathrm{Re}\,\chi(k, w=0) = \frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \frac{f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q})}{\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q}$$

$$f(\varepsilon_q) - f(\varepsilon_{k+q}) \simeq \left.\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon_q} (\varepsilon_q - \varepsilon_{k+q})$$

$k \to 0$

$$\mathrm{Re}\,\chi(k\to 0, w=0) = -\frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \left.\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon_q}$$



Rotem statikus szuszceptibilitás

$\varepsilon_q \mp \tilde{\mu} B$

homogén mágneses tér: $B \uparrow$

$$M = Vm = \tilde{\mu} \sum_q \left(\langle a^+_{q\uparrow} a_{q\uparrow} \rangle - \langle a^+_{q\downarrow} a_{q\downarrow} \rangle \right) = \tilde{\mu} \sum_q \left(f(\varepsilon_q - \tilde{\mu} B) - f(\varepsilon_q + \tilde{\mu} B) \right) \simeq$$

$$\simeq \tilde{\mu} \sum_q \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon_q} (-\tilde{\mu} B) \cdot 2$$

$$\Rightarrow \quad m = \underbrace{-\frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon_q}}_{\chi_T} \cdot B$$

megegyezik a $\mathrm{Re}\, \chi(q \to 0, \omega = 0)$-val

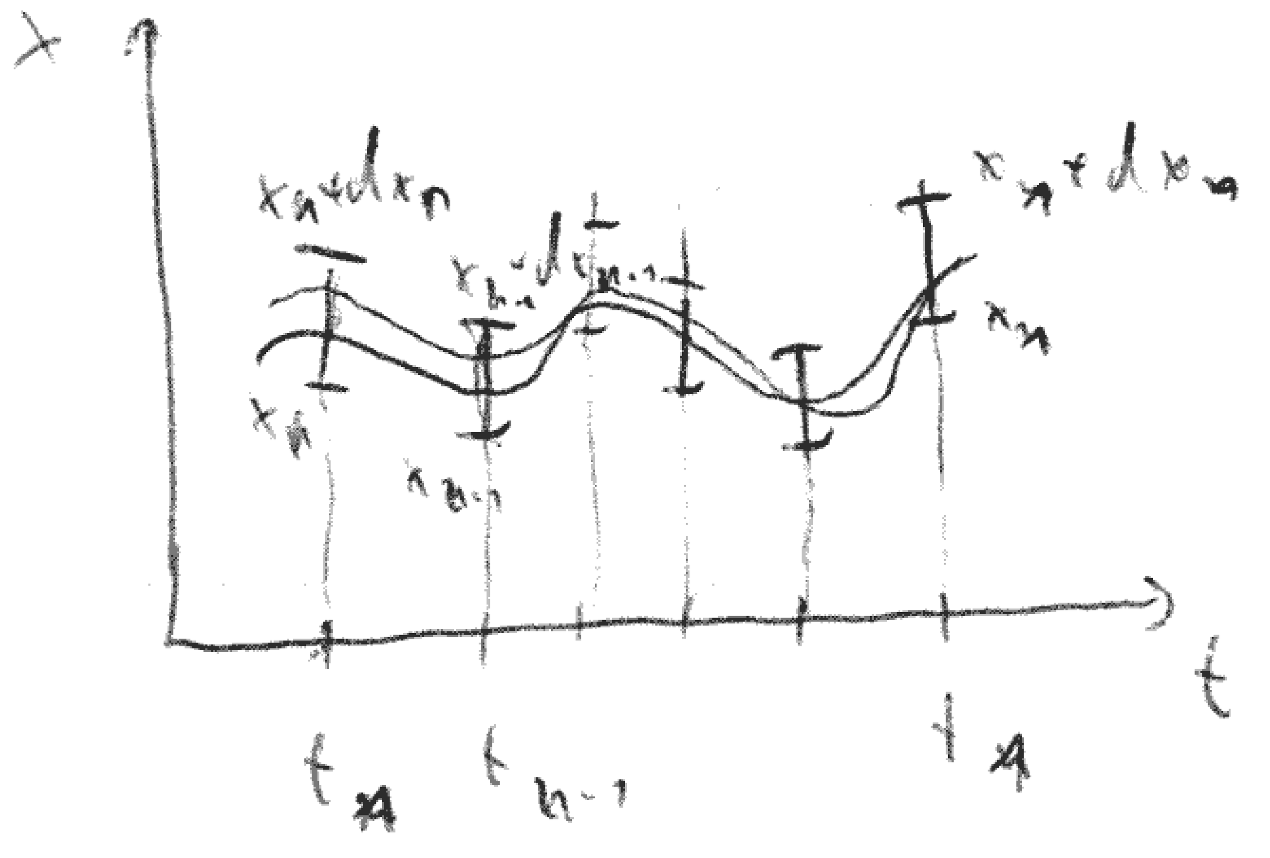
$$\chi_T = \chi(q \to 0, \omega = 0)$$

Sztochasztikus folyamatok

X fizikai mennyiség $\quad x(t)$

idősor: $\quad x(t_1), x(t_2), \dots x(t_n)$

$$P(x_1 < x(t_1) < x_1 + dx_1, \dots, x_n < x(t_n) < x_n + dx_n) = p_n(x_1 t_1 \dots x_n t_n) dx_1 \dots dx_n$$



$p_1(x_1, t_1)$

$p_2(x_1 t_1 x_2 t_2)$

$\vdots$

$p_n(x_1 t_1 \dots x_n t_n)$

$\vdots$

t-ben $\langle x \rangle = \int p_1(x,t)\, x\, dx \quad$ várható értéke x-nek

$\langle x(t_1) x(t_2) \rangle = \int p_2(x_1 t_1 x_2 t_2)\, x_1 x_2\, dx_1 dx_2 \quad$ korrelációs f

követelmények:

normálás: $\int p_n(x_1 t_1 \dots x_n t_n) dx_1 \dots dx_n = 1$ $\qquad dx_i$

kompatibilitás: $p_{n-1}(x_1 t_1 \dots x_{i-1} t_{i-1}\, x_{i+1} t_{i+1} \dots x_n t_n) = \int p_n(x_1 t_1 \dots x_i t_i \dots x_n t_n)$

diszkrét változókra:

$x(t) \to m(t)$ egész értékű változó

$p_n(m_1 t_1, m_2 t_2 \ldots m_n t_n)$

$\int dx \to \sum_m$

Markov-(folyamatok) tulajdonság:

feltételes valószínűség: $P(x_1 t_1 | x_2 t_2 \ldots x_n t_n) = \dfrac{p_n(x_1 t_1, x_2 t_2 \ldots x_n t_n)}{p_{n-1}(x_2 t_2 \ldots x_n t_n)}$

Markov tulajdonság: $P(x_1 t_1 | x_2 t_2 \ldots x_n t_n) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)$ átmeneti valószínűség

$(x_3 t_3 \ldots x_n t_n)$-től nem függ

$p_n(x_1 t_1 \ldots x_n t_n) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, p_{n-1}(x_2 t_2 \ldots x_n t_n) =$

$= P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, P(x_2 t_2 | x_3 t_3) \ldots P(x_{n-1} t_{n-1} | x_n t_n)\, p_1(x_n t_n)$

$$\boxed{\begin{array}{l} P(xt|x't') \\ p_1(x,t) \end{array}}$$

← átmeneti valószínűség

← Meghatározza a teljes hierarchiát (csak Markov folyamatnál!)

$p_2(x_1 t_1, x_2 t_2) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, p_1(x_2 t_2)$

$\downarrow \int \ldots dx_2$

$p_1(x_1 t_1) = \int P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, p_1(x_2 t_2)\, dx_2 \qquad t_1 > t_2$

Chapman-Kolmogorov-egyenlet

$p_3(x_1 t_1, x_2 t_2, x_3 t_3) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, P(x_2 t_2 | x_3 t_3)\, p_1(x_3 t_3)$

$\int \ldots dx_2$

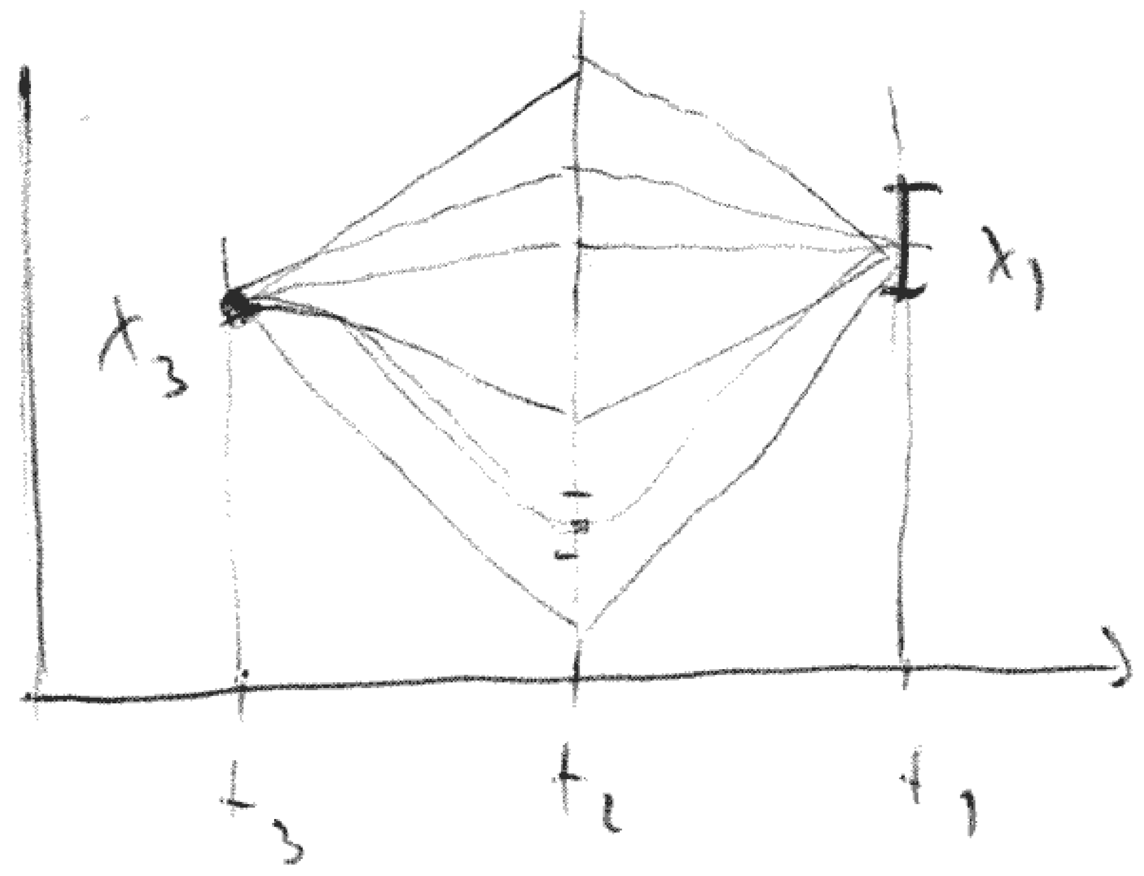
$p_2(x_1 t_1, x_3 t_3) = \left[\int P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, P(x_2 t_2 | x_3 t_3)\, dx_2\right] p_1(x_3 t_3)$

$\hookrightarrow P(x_1 t_1 | x_3 t_3) \cdot p_1(x_3 t_3)$

$\Rightarrow$

$$\Rightarrow \boxed{P(x_1 t_1 | x_3 t_3) = \int P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, P(x_2 t_2 | x_3 t_3)\, dx_2}$$

Chapman–Kolmogorov egyenlet



Homogén Markov folyamat: $P(x_1 t_1 | x_2 t_2) = P(x_1, t_1 + \tau | x_2 t_2 + \tau) =$

ha $\tau = -t_2$ $\Rightarrow$ $= P(x_1, t_1 - t_2 | x_2, 0)$

Stacionárius állapot (folyamat):

$$p_1(x,t) = p_1(x, t+\tau) = p_1^*(x)$$

ergodikus Markov folyamat:

$$\lim_{t\to\infty} P(x, t | x') = p^*(x) \qquad (x'\text{-től független!})$$

$$p_1(x,t) = \int P(x t | x')\, p_1(x', 0)\, dx'$$

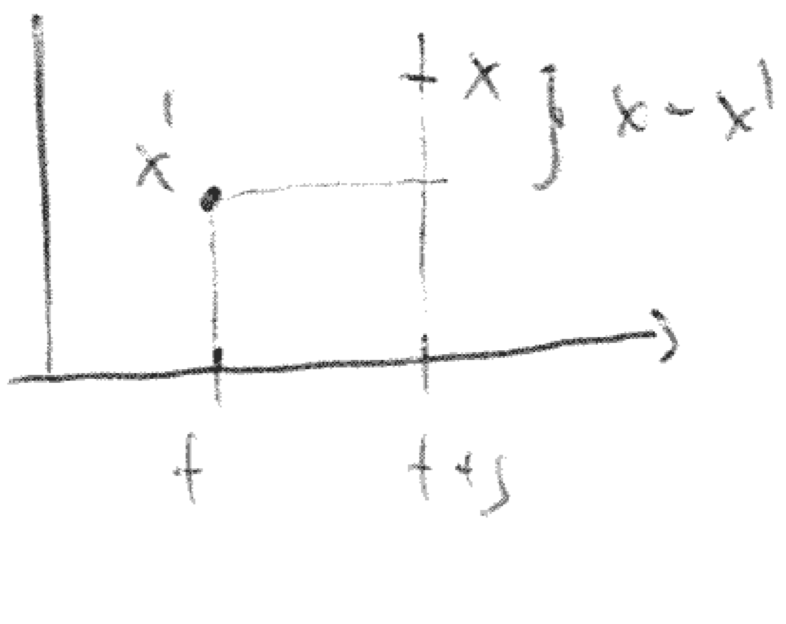
(p_1 határeloszlás)

$$\lim_{t\to\infty} p_1(x,t) = \int p^*(x)\, p_1(x',0)\, dx' = p^*(x) \underbrace{\int p_1(x',0)\, dx'}_{1} = p^*(x)$$

diffúziós folyamatok:

def: növekmények momentumai (feltételes)

(s-el osztva is 0-hoz tart) kis ordó



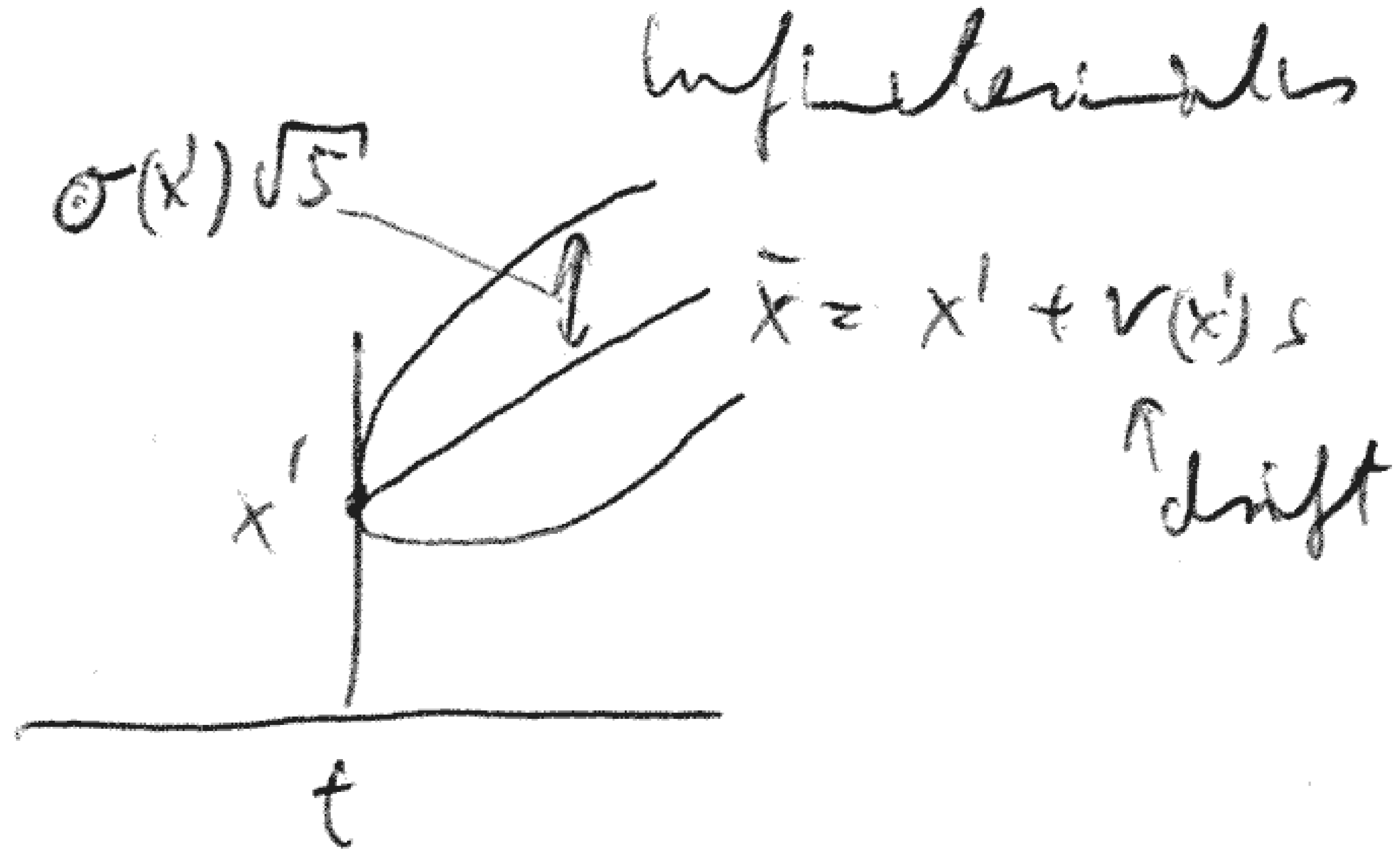
$$\int P(x s | x')\, (x-x')^n\, dx = \begin{cases} v(x') s + o(s) & n = 1 \\ \sigma^2(x') s + o(s) & n = 2 \\ o(s) & n \geq 3 \end{cases}$$

$$\overline{(x - x')} = v(x') s + o(s)$$

$$\overline{(x-x')^2} - \underbrace{\overline{(x-x')}^2}_{o(s)} = \sigma^2(x') s + o(s)$$

$\boxed{6/3}$

$$P(xs|x') \simeq C\, e^{-\frac{(x-x'-v(x')s)^2}{2\sigma^2(x')s}}$$



Szélesedés diffúzió $\sim \sqrt{s}$

s infinitezimális $(\to 0)$

$$x - x' \sim \sqrt{s} \qquad \frac{\sqrt{s}}{s} \sim \frac{1}{\sqrt{s}} \to \infty \quad \Rightarrow \text{nem differenciálható}$$

Chapman-Kolmogorov-egyenlet $\xrightarrow[\text{diffúziós folyamat}]{}$ Fokker-Planck-egyenlet

$$P(xt|x'): \quad \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(v(x)P\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sigma^2(x)P\right)$$

$$P(x\, t=0 | x') = \delta(x - x')$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

7. előadás (3)

Sztochasztikus folyamatok < Markov folyamat < diffúziós folyamat; „ugró" folyamat

Sztochasztikus folyamatok < nem Markov folyamat

s-el arányos 0-hoz tart

diffúziós folyamat: $$\int (x-x')^n P(x\,s|x')\,dx = \begin{cases} v(x')s + o(s) & n=1 \\ \sigma^2(x')s + o(s) & n=2 \\ o(s) & n\geq 3 \end{cases}$$

Feltételes várható érték:

x'

$0 \quad t \quad t+s$ s infinitezimális

$$\int f(x)\,P(x,t+s|x')\,dx =$$

$$= \int f(x)\left[P(x,t|x') + \frac{\partial P(x,t|x')}{\partial t}\cdot s + o(s)\right]$$

$$= \int dx\, f(x)\int d\tilde{x}\, P(x,s|\tilde{x})\,P(\tilde{x},t|x') = \%$$

$$f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x-\tilde{x}) + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})(x-\tilde{x})^2 + \dots$$

parc. int

$$\% = \int d\tilde{x}\left[f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})\,v(\tilde{x})\,s + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})\,\sigma^2(\tilde{x})\,s + o(s)\right]P(\tilde{x},t|x') =$$

$$= \int dx\, f(x)\left[P(x,t|x') - \frac{\partial}{\partial x}\big(v(x)\,P(x,t|x')\big)s + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sigma^2(x)\,P(x,t|x')\,s + o(s)\right]$$

természetes határfeltételek $x \to \pm\infty$-ben P gyorsan tart 0-hoz

tetszőleges $f(x) \Rightarrow$ $$\frac{\partial P(x,t|x')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(v(x)P(x,t|x')\big) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\sigma^2(x)}{2}P(x,t|x')\right)$$

Fokker–Planck egyenlet

természetes határfeltétel, kezdeti feltétel: $P(x,t=0|x') = \delta(x-x')$

$$P_1(x,t) = \int dx'\,P(x,t|x')\,P_1(x',t=0)$$

$P_1(x,t)$ kielégíti a Fokker-Planck egyenletet

Továbbá: $\sigma^2(x)$ nem függ x-től

Wiener-folyamat: $v(x) \equiv 0$, $\sigma^2 = 2D$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad \text{(diffúziós egyenlet)}$$

generátor fv.:

$P(x)$ valószínűségi sűrűség

$$\phi(z) = \overline{e^{zx}} = \int dx\, P(x)\, e^{zx} \qquad \text{momentum-generátor fv.}$$

$$\hookrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} z^l\, \overline{x^l}$$

$$\left.\frac{\partial^l \phi(z)}{\partial z^l}\right|_{z=0} = \overline{x^l}$$

$\ln \phi(z)$ kummuláns generátor fv.

$$\ln \phi(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} z^l\, k_l \quad \leftarrow \text{kummulánsok}$$

$$\left.\frac{\partial^l \ln \phi}{\partial z^l}\right|_{z=0} = k_l$$

$$\frac{\partial \ln \phi}{\partial z} = \frac{1}{\phi}\phi' \qquad z=0 \qquad k_1 = \overline{x}$$

$$\frac{\partial^2 \ln \phi}{\partial z^2} = \frac{\phi''}{\phi} - \frac{1}{\phi^2}\phi'\cdot\phi' \qquad z=0 \qquad k_2 = \overline{x^2} - \overline{x}^2$$

$$\frac{\partial^3 \ln \phi}{\partial z^3} = \frac{\phi'''}{\phi} + \frac{2}{\phi^3}\phi'^3 - \frac{1}{\phi^2} 2\phi'\phi'' - \frac{1}{\phi^2}\phi'\phi''$$

$z=0$ $\quad k_3 = \overline{x^3} + 2\overline{x}^3 - 3\,\overline{x^2}\,\overline{x}$ ...

$= \overline{x^3} - 3\overline{x}\left(\overline{x^2} - \overline{x}^2\right) - \overline{x}$ ...

[illegible]

általánosan $x\,x\,x$

átlag $\overline{x^3} - \overline{x}\,x\,x - \overline{x}\,\overline{x}\,\overline{x}$

Gauss eloszlás:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{x^2}{2\Delta}}$$

$$\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2\Delta}} e^{zx} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{1}{2\Delta}(x-\Delta z)^2}}_{1} e^{\frac{1}{2}\Delta z^2}$$

$$-\frac{1}{2\Delta}\left(x^2 - 2\Delta z x + \Delta^2 z^2 - \Delta^2 z^2\right)$$

$$\phi(z) = e^{\frac{1}{2}\Delta z^2} \Rightarrow \begin{array}{l} k_1 = 0 \\ k_2 = \Delta \\ k_l = 0 \quad (l \geq 3) \end{array}$$

$$\left(\text{ha} \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta}} \Rightarrow \phi(z) = e^{x_0 z + \frac{\Delta}{2} z^2} \right)$$

momentumok:

$$\phi(z) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \frac{\Delta^l z^{2l}}{2^l} = \% \quad \Leftarrow \text{ z-nek csak páros hatványai}$$

$$\overline{x^l} = \begin{cases} 0 & \text{ha } l \text{ páratlan} \\ \neq 0 & \text{ha } l \text{ páros} \end{cases}$$

$$\% = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l)!} \underbrace{\frac{\Delta^l z^{2l}}{2^l\, l!} (2l)!}_{\overline{x^{2l}}} \qquad \overline{x^{2l}} = \Delta^l \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2l-1)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \qquad P(t=0) = \delta(x-x')$$

$$\phi(z, t=0) = \int e^{zx} \delta(x-x')\, dx = e^{zx'}$$

$$\int e^{zx} \_\_ \, dx$$

$$\int e^{zx} \frac{\partial P}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \phi(z,t)$$

$$\int e^{zx} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx = z^2 \int e^{zx} P\, dx = z^2 \phi(z,t)$$

parc. int

$$\frac{\partial \phi(z,t)}{\partial t} = D z^2 \phi(z,t)$$

$$\frac{\partial \phi(z,t)}{\partial t} = D z^2 \phi(z,t)$$

$$\frac{\partial \phi}{\phi} = D z^2 \partial t \qquad \ln \frac{\phi(z,t)}{\phi(z,0)} = D z^2 t$$

$$\phi(z,t) = \phi(z,0)\, e^{D z^2 t} = e^{z x' + D z^2 t}$$

$$\bar{x} = x'$$

$$\overline{x^2} - \bar{x}^2 = 2Dt = \sigma^2 t$$

$$\boxed{P(x t | x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}}\, e^{-\frac{(x-x')^2}{2\sigma^2 t}}}$$

<u>Wiener-folyamat várható értéke:</u> $w(t) \qquad w(t=0)=0$

$$P(wt|0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}}\, e^{-\frac{w^2}{2\sigma^2 t}}$$

$$\overline{w} = 0 \quad , \quad \overline{w^{2l+1}} = 0$$

$$\overline{w^2} = \sigma^2 t$$

$$\overline{w^{2l}} = (\sigma^2 t)^l \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots (2l-1)$$

<u>korrelációs fv:</u> $\overline{w(t)\, w(t')} \qquad t, t' > 0 \qquad P(w',t'|0)\, w'$

$$\underset{(t>t')}{\overline{w(t)\, w(t')}} = \int dw\, dw'\, \underbrace{P_2(wt, w't')}_{P(w,t-t'|w')\, P(w',t'|0)}\, w w' = \int dw' \underbrace{\left(\int dw\, P(w,t-t'|w')\, w\right)}_{w'} =$$

$$= \int dw'\, w'^2\, P(w',t|0) = \sigma^2 t'$$

$$\overline{w(t)\, w(t')} = \sigma^2 \min(t,t') \qquad \overline{w(t)\, w(t')} - \underbrace{\overline{w(t')^2}}_{\sigma^2 t'} = 0$$

egymástól függetlenek

$$\underbrace{\overline{(w(t) - w(t'))\, w(t')}}_{\text{növekmény}} \overset{t>t'}{=} \underbrace{\overline{w(t) - w(t')}}_{0}\ \underbrace{\overline{w(t')}}_{0} = 0 \quad \Rightarrow$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

Gauss típusú fehér zaj: általánosított sztochasztikus folyamat

(momentumok / kumulánsok : disztribúciók)

1. és 2. kumulánsa

fehér zaj: $\overline{\xi(t)} = 0$ $\qquad \overline{\xi(t)\,\xi(t')} = \sigma^2 \delta(t-t')$

$Y(t) = \int_0^t \xi(s)\,ds$ $\qquad Y(t)$: Gauss-eloszlású

$Y(t=0) = 0 \qquad \overline{Y(t)} = 0$

$$\overline{Y(t)\,Y(t')} = \int_0^t ds \int_0^{t'} ds'\, \overline{\xi(s)\,\xi(s')} \underset{t>t'}{=} \int_0^t ds \int_0^{t'} ds'\, \sigma^2 \delta(s-s') = \sigma^2 \int_0^{t'} ds' = \sigma^2 t'$$

$$\overline{Y(t)\,Y(t')} = \sigma^2 \min(t,t')$$

$$Y(t) = W(t)$$

Langevin egyenlet: $\boxed{\dot{x}(t) = \underbrace{v(x(t))}_{\text{determinisztikus mozgásegyenlet}} + \underbrace{\xi(t)}_{\text{zaj}}}$

$\xi(t)$ Gauss-típusú fehér zaj $\qquad \overline{\xi(t)} = 0 \qquad \overline{\xi(t)\,\xi(t')} = \sigma^2 \delta(t-t')$

értelmezés: $dx(t) = x(t+dt) - x(t) = v(x(t))\,dt + dW(t)$

$dW(t) = W(t+dt) - W(t)$

$$\boxed{dx(t) = v(x(t))\,dt + dW(t)} + o(dt)$$

sztochasztikus diff. egyenlet

$x(t)$ Markov folyamat

($x(t+dt)$-t meghatározza: $x(t)$, $dW(t)$ független a $t'<t$ eseményektől)

$x(t)$ diffúziós folyamat

$$\overline{dx(t)} = v(x(t))\,dt + \underbrace{\overline{dW(t)}}_{=0} + o(dt)$$

$$\overline{dx(t)^2} = \overline{\left(v(x(t))\,dt + dW(t)\right)^2} = \underbrace{\left(v(x(t))\,dt\right)^2}_{o(dt)} + v(x(t))\,dt\,\underbrace{\overline{dW(t)}}_{0} + \underbrace{\overline{dW(t)^2}}_{\sigma^2 dt} =$$

$$= \sigma^2 dt + o(dt)$$

$$\overline{dx(t)^3} = \overline{\left(v(x(t))\,dt + dW(t)\right)^3} = o(dt)$$

$$\overline{dx(t)^n} = o(dt) \qquad (n \geq 3)$$

Fokker - Planck egyenlet:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vP) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\sigma^2}{2}P\right)$$

$\sigma(x)$: - Ito - féle értelmezés (intervallum elején veszi a f értéket)

- Stratonovich - féle értelmezés (intervallum közepén veszi a f értéket)

$$\cancel{dx(t) =} \quad \dot{x}(t) = v(x(t)) + \alpha(\overset{x(t)}{\overset{\downarrow}{x}})\,\xi(t)$$

$$dx(t) = v(x(t))\,dt + \alpha(x(t))\,dW(t) \qquad \text{(Ito)}$$

$$+ \alpha\left(\frac{x(t) + x(t+dt)}{2}\right) dW(t) \qquad \text{(Stratonovich)}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$\boxed{\text{8. előadás}}$ (3)

Langevin egyenlet $\quad \dot{x} = v(x) + \xi(t)$

$$\overline{\xi(t)} = 0, \quad \overline{\xi(t)\xi(t')} = \sigma^2 \delta(t-t') = 2D\,\delta(t-t')$$

Fokker-Planck egyenlet: $\quad \dfrac{\partial P}{\partial t} = -\dfrac{\partial}{\partial x}\big(v(x) P\big) + D\dfrac{\partial^2 P}{\partial x^2}$

Több változó: $\quad \underline{x} = (x_1, \ldots x_n)$

Langevin egyenlet: $\quad \dot{x}_i = v_i(\underline{x}) + \xi_i(t)$

$$\overline{\xi_i(t)} = 0 \qquad \overline{\xi_i(t)\,\xi_j(t')} = 2D_{ij}\,\delta(t-t')$$

$D_{ij} = D_{ji}$ pozitív definit

Fokker-Planck egyenlet: $\quad P(\underline{x}, t | \underline{x}')$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\big(v_i(\underline{x}) P\big) + \sum_{i,j} D_{ij}\frac{\partial^2 P}{\partial x_i \partial x_j} =$$

$$= -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\Big[\underbrace{v_i P - \sum_j D_{ij}\frac{\partial P}{\partial x_j}}_{J_i \text{ valószínűségi áramsűrűség}}\Big] \qquad \text{(kontinuitási egyenlet)}$$

Stacionárius megoldás: (sztochasztikus folyamatok szempontjából)

$P_1(x,t) = P_s(x)$ (t-től független) $\quad P_s(x) = e^{-\phi(x)}$

↖ stacionárius eloszlás

1 változó: $\quad 0 = -\dfrac{\partial}{\partial x}\Big(\underbrace{v(x)P_s - D\dfrac{\partial P_s}{\partial x}}_{J \text{ valószínűségi áram}}\Big) \qquad J(x) = \text{állandó}$

$v(x)P_s(x) - D\dfrac{\partial P_s}{\partial x} = \text{állandó} = 0$

$P_s(x) \to 0 \quad (x \to \pm\infty)$

$$D \frac{\partial p_s}{\partial x} = v(x)\, p_s(x) \quad \longrightarrow \quad p_s = e^{-\phi}$$

$$\ln \frac{p_s}{C} = \frac{1}{D}\int v(x)\,dx \qquad p_s(x) = C\, e^{\frac{1}{D}\int v(x)\,dx}$$

$$-D\frac{\partial \phi}{\partial x} e^{-\phi} = v\, e^{-\phi} \quad \Rightarrow \quad \boxed{v = -D\frac{\partial \phi}{\partial x}}$$

Több változó:

$$-\sum_i \frac{\partial J}{\partial x_i} = 0 \qquad p_s = e^{-\phi}$$

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{\left[v_i + \sum_j D_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] e^{-\phi}}_{J_i} = 0$$

(A) legyen $J_i = 0$

$$v_i = -\sum_j D_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$$

(B) $J_i \neq 0$

antiszimm. poz. definit, szimm.

egy példa: $$v_i = \sum_j Q_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \sum_j D_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$$

ezt behelyettesítve

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\sum_j Q_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] e^{-\phi} = 0 =$$

$$= \sum_{ij} \Big(Q_{ij} \underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j}}_{\text{szimm. mtx}} e^{-\phi} - \underbrace{Q_{ij}}_{\text{anti szimm.}} \underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial x_j}\frac{\partial \phi}{\partial x_i}}_{\text{szimm. mtx}} e^{-\phi} \Big) = 0$$

(Tr (szimm. × anti-szimm.) = 0)

determinisztikus egyenlet:

$$\dot{x}_i = v_i(\underline{x})$$

$x_i(t)$ megoldás: $\phi(\underline{x}(t))$

$$\frac{d\Phi(\underline{x}(t))}{dt} = \sum_i \frac{\partial\Phi}{\partial x_i}\dot{x}_i = \sum_i\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x_i}v_i\right) = \sum_{i,j} a_{ij}\frac{\partial\Phi}{\partial x_i}\frac{\partial\Phi}{\partial x_j} - \sum_{ij} D_{ij}\frac{\partial\Phi}{\partial x_i}\frac{\partial\Phi}{\partial x_j} \le 0$$

antiszimm. / szimm. — poz. def., szimm.

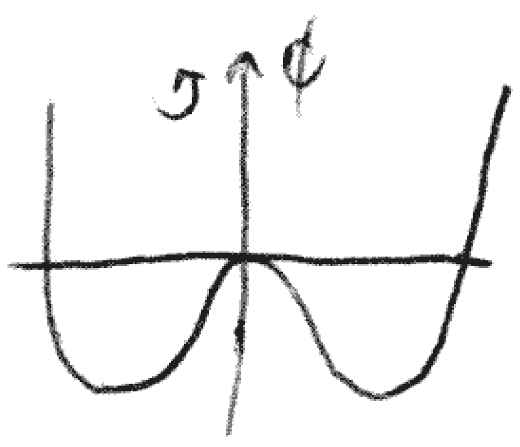
konzervatív → (~~[illegible]~~ mozgás) — disszipatív mozgás

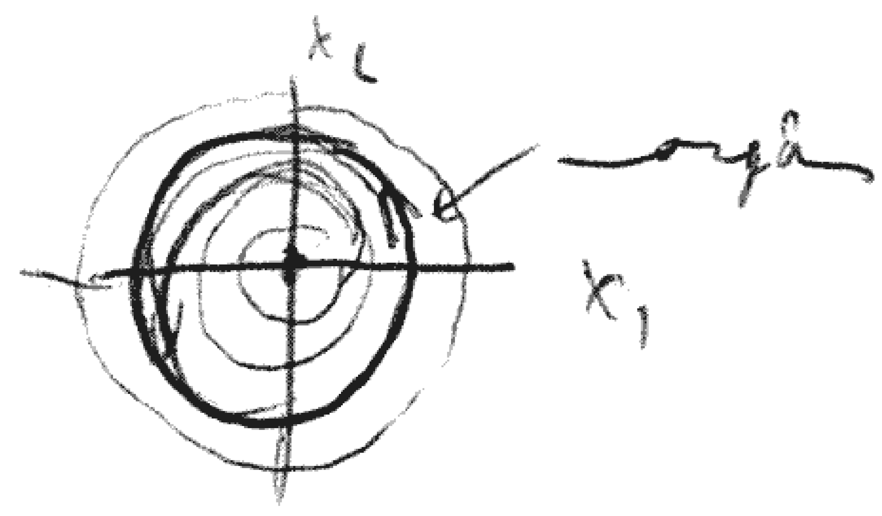
Φ-t megőrzi — $\dot{\Phi} \le 0$

Φ potenciál minimum pontjába viszi be a determinisztikus mozgás

konzervatív rész: a rendszer minimum pontján mozog

pl: (mexikói kalap (Sombrero))





($\Phi(\underline{x}(t))$ Ljapunov fv)

(csökken és alulról korlátos)

lineáris folyamat:

$$v(x) = -\gamma x$$

Langevin egyenlet: $\dot{x} = -\gamma x + \xi \qquad \overline{\xi(t)} = 0 \qquad \overline{\xi(t)\xi(t')} = 2D\delta(t-t')$

Fokker-Planck egyenlet: $$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\gamma x P) + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \qquad P(x,0|x') = \delta(x-x')$$

stac. eloszlás:

$$\Phi = \frac{1}{D}\int v(x)\,dx = -\frac{\gamma}{D}\int x\,dx = -\frac{\gamma}{D}\frac{x^2}{2}$$

$$P_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\frac{D}{\gamma}}}e^{-\frac{\gamma}{2D}x^2}$$

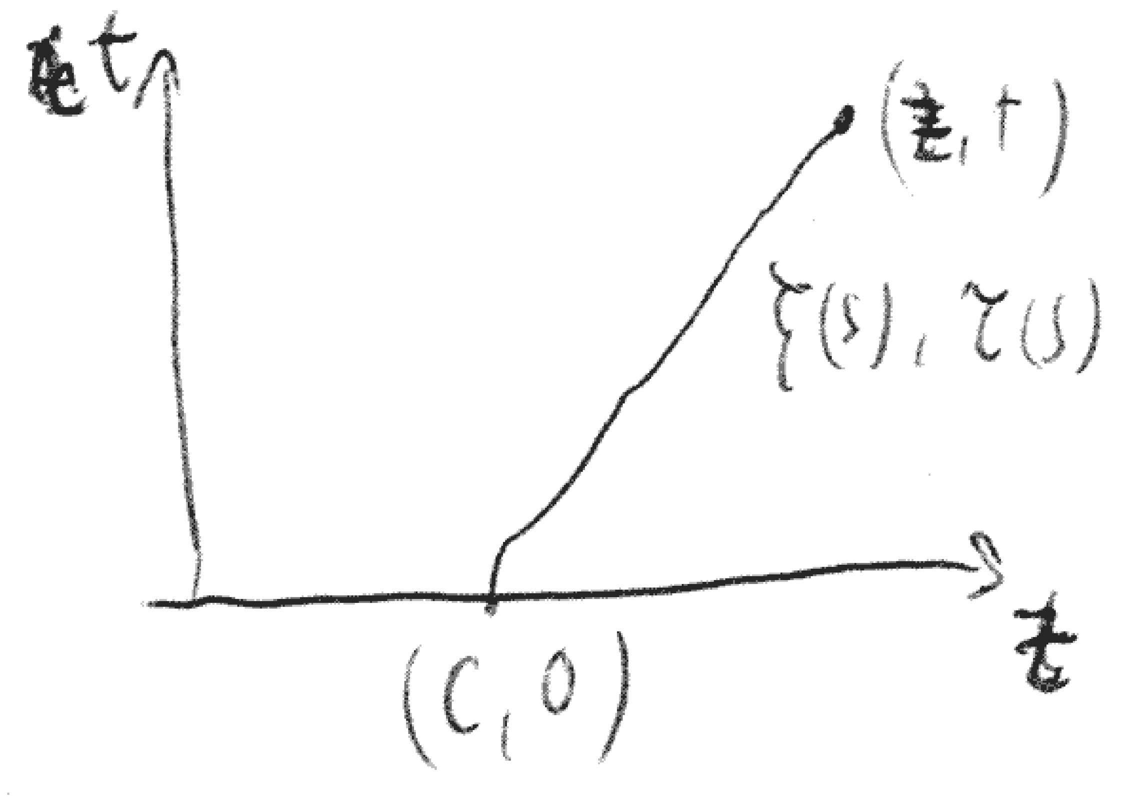
generátor fv: $G(z,t) = \overline{e^{zx}} \qquad G(z,0) = e^{zx'}$

$$\int\frac{\partial P}{\partial t}e^{zx}\,dx = \frac{\partial}{\partial t}G(z,t)$$

$$\int\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}e^{zx}\,dx = \int P z^2 e^{zx}\,dx = z^2 G(z,t)$$

$$\gamma \int \frac{\partial}{\partial x}(xP)\, e^{zx} = -\gamma \int x P e^{zx}\, dx \cdot z = -\gamma z \frac{\partial}{\partial z} G(z,t)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\gamma z \frac{\partial G}{\partial z} + D z^2 G \qquad G(z,0) = e^{z x'} \qquad \Rightarrow \text{ 1. rendű diff. e.}$$



$$\xi(s=0) = C \qquad \tau(s=0) = 0$$

$$\cancel{\xi(s=1) = z} \qquad \cancel{\tau(s=1) = t}$$

$$G(z=\xi(s), t=\tau(s)) \equiv G(s)$$

$$\frac{dG}{ds} = \frac{\partial G}{\partial z}\frac{d\xi}{ds} + \frac{\partial G}{\partial t}\frac{d\tau}{ds} =$$

$$\frac{d\xi}{ds} = +\gamma \xi \nearrow \xi(s) = C e^{\gamma s}$$

$$= +\gamma \xi \frac{\partial G}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial t} =$$

$$\frac{d\tau}{ds} = 1 \longrightarrow \tau = s$$

$$= D \xi^2 G$$

$$\frac{dG(s)}{ds} = D \xi^2(s)\, G(z,s) \rightarrow \frac{dG}{G} = D \xi^2(s)\, ds$$

$$\ln \frac{G(s)}{G(0)} = D \int_0^s \xi^2(s')\, ds' =$$

$$= D \int_0^s C^2 e^{2\gamma s'}\, ds' =$$

$$= D C^2 \frac{e^{2\gamma s} - 1}{2\gamma}$$

(z,t) pont $\quad \tau(s) = t \quad s = t$

$\qquad \xi(s) = z \quad z = C e^{\gamma t}$

$$G(s) = \underbrace{G(0)}_{G(C,0) = e^{C x'}} e^{\frac{D}{2\gamma} C^2 (e^{2\gamma s} - 1)} = G(\xi(s), \tau(s))$$

$$s = t$$

$$C = z e^{-\gamma t}$$

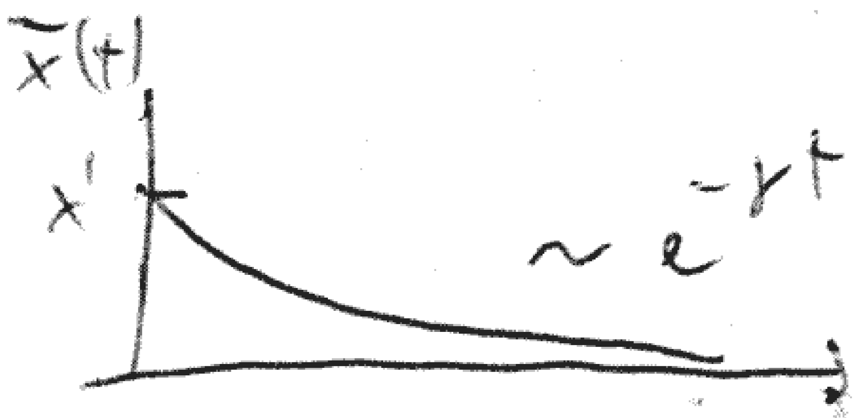
$$G(z,t) = e^{z x' e^{-\gamma t} + \frac{D}{2\gamma} z^2 e^{-2\gamma t}\left(e^{2\gamma t}-1\right)}$$

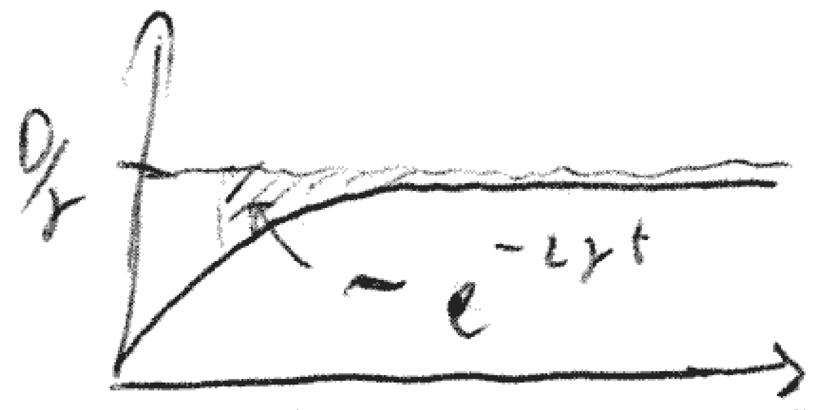
$$G(z,t) = \exp\left\{ \underbrace{z x' e^{-\gamma t}}_{\bar{x}} + \frac{z^2}{2} \underbrace{\frac{D}{\gamma}\left(1-e^{-2\gamma t}\right)}_{\overline{x^2}-\bar{x}^2} \right\}$$

$$p(xt|x') = $$

Gauss eloszlás

$$P(x,t|x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi \alpha^2(t)}}\, e^{-\frac{\left(x - x' e^{-\gamma t}\right)^2}{2\alpha^2(t)}} \qquad \alpha^2(t) = \frac{D}{\gamma}\left(1-e^{-2\gamma t}\right)$$





Ornstein – Uhlenbeck - folyamat

ergodikus: $\forall$ kezdeti eloszlás a stacionárius eloszlásba "fut be"

$$P_t(x,t|x') \to P_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D/\gamma}}\, e^{-\frac{\gamma}{2D}x^2}$$

Brown - mozgás: (x,p)

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} - \gamma p + \xi(t)$$

$\xi(t)$ Gauss típusú fehér zaj

$\overline{\xi(t)} = 0, \quad \overline{\xi(t)\xi(t')} = 2D\delta(t-t')$

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} - \gamma m \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \xi$$

egyensúlyi eloszlás (stac. állapot): ξ határozza $\quad e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_BT}} = e^{-\phi} C$

$$\phi = \frac{\mathcal{H}}{k_BT}$$

$$\dot{x} = k_BT \frac{\partial \phi}{\partial p}$$

$$\dot{p} = -k_BT \frac{\partial \phi}{\partial x} - \gamma m k_BT \frac{\partial \phi}{\partial p} + \xi$$

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k_B T \\ -k_B T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma m k_B T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial p} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \xi \end{pmatrix}$$

konzervatív (antiszimm.) — disszipatív (szimm.)

$$\boxed{D = \gamma m k_B T}$$

$$p(t+dt) = p(t) - \frac{\partial U}{\partial x} dt - \gamma p(t) dt + dW_t$$

$\sim dt^2$-es tagokat elhagyva

Stac. állapotban: $\overline{p(t+dt)^2} = \overline{p^2(t)} + \overline{dW_t^2} - \overline{2p(t)\frac{\partial U}{\partial x}dt} - \overline{2\gamma p^2(t) dt} + \overline{2p(t)dW_t} - \overline{2\frac{\partial U}{\partial x}dt\,dW_t} - \overline{2\gamma p(t) dW_t dt}$

egyenlő

$\underbrace{}_{\overline{\frac{\partial U}{\partial x}}\cdot\overline{dW_t} = 0}$ $\quad \underbrace{}_{\overline{p(t)}\,\overline{dW_t} = 0}$

$\overline{p(t)\frac{\partial U}{\partial x}} = 0$

$\overline{p(t)}\,\overline{dW} = 0$

$$(2D =)\ \overline{dW_t^2} = 2\gamma \underbrace{\overline{p(t)^2}}_{k_B T m} \Rightarrow \boxed{D = \gamma k T m}$$

$\dot{x} = v$

$$\dot{v} = -\frac{\partial U}{\partial x}\cdot\frac{1}{m} - \gamma v + \frac{\xi}{m} \qquad \frac{\overline{\xi(t)\xi(t')}}{m^2} = 2\frac{\gamma k_B T}{m}$$

$P(x, v, t | \ldots)$ Fokker–Planck egyenlet:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vP) - \frac{\partial}{\partial v}\left(-\frac{\partial U}{\partial x}\frac{1}{m} - \gamma v\right) + \frac{\gamma k_B T}{m}\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}$$

<u>túlcsillapított mozgás:</u> $\dot{p} \approx 0$ (a test olyan gyorsan megáll, hogy a ráhatótól függ hogy hol van...)

$$-\frac{\partial U}{\partial x} - \gamma p + \xi = 0 \qquad (p \sim \dot{x})$$

$$\boxed{\dot{x} = -\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\xi}{\gamma m}} \quad \text{Langevin egyenlet}$$

$$\overline{\frac{\xi}{\gamma m}\frac{\xi}{\gamma m}} = \frac{2\gamma m k_B T}{(\gamma m)^2} = \frac{k_B T}{\gamma m}$$

$P(x, t | \ldots)$

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = +\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial U}{\partial x}\right) + \frac{k_B T}{\gamma m}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}}$$

Fokker–Planck egyenlet (Kramers egyenlet)

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

9. előadás (3)

$$\dot x = \frac{p}{m} \qquad \overline{\xi(t)} = 0$$

$$\dot p = -\frac{\partial U}{\partial x} - \gamma p + \xi \qquad \overline{\xi(t)\,\xi(t')} = 2\gamma m k_B T\,\delta(t-t')$$

$$\underbrace{\qquad\qquad}_{P_s(x,p) \sim e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}}} \qquad \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

Szabad Brown-mozgás

$U(x) = 0$

$$m\dot v = -\underbrace{\gamma m}_{\lambda} v + \xi \qquad \overline{\xi\,\xi} = 2\lambda k_B T\,\delta(t-t')$$

Ornstein-Uhlenbeck folyamat:

Brown | O-U

$\frac{\gamma k_B T}{} \neq D$

$$\dot v = -\gamma v + \frac{\xi}{m} \qquad \overline{\frac{\xi}{m}\,\frac{\xi}{m}} = 2\frac{\gamma}{m} k_B T\,\delta(t-t')$$

más megoldási mód:

(diff. egyenlet megoldása)

$$v(t) = \underbrace{v_0 e^{-\gamma(t-t_0)}}_{\text{lecseng } \frac{1}{\gamma} \text{ idő alatt}} + \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} dt'\, \underbrace{e^{-\gamma(t-t')}}_{\frac{1}{\gamma} \text{ ideig emlékszik } \xi(t')\text{-re}}\, \xi(t') \qquad t = t_0:\ v(t_0) = v_0$$

$$\overline{v}(t) = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)}$$

$\frac{1}{\gamma}$ idő után beáll a stacionárius állapot

Stac. állapot: $t_0 \to -\infty$

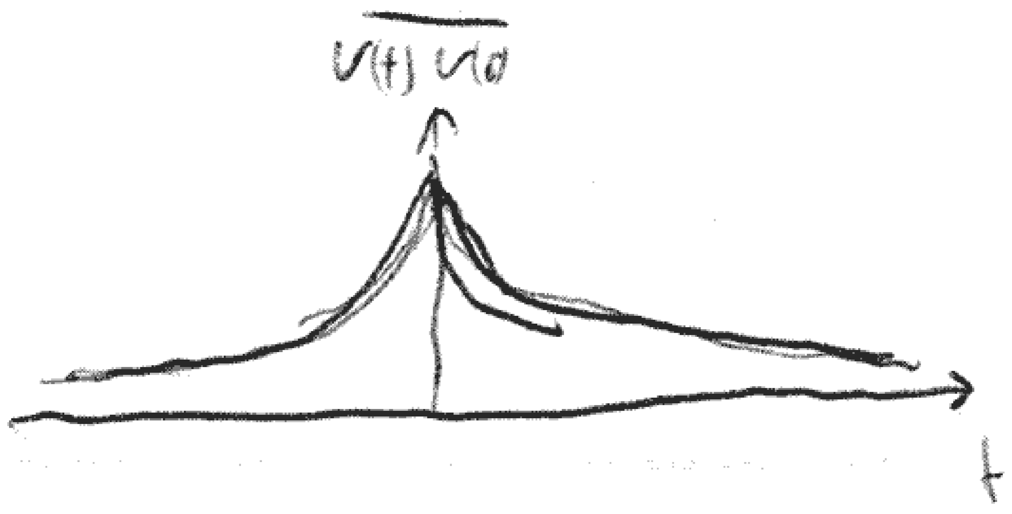
$$v(t) = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-\gamma(t-t')}\, \xi(t') \qquad \overline{v(t)} = 0$$

$$\overline{v(t)\,v(t')} = \frac{1}{m^2}\int_{-\infty}^{t} ds \int_{-\infty}^{t'} ds'\, e^{-\gamma(t-s)}\, e^{-\gamma(t'-s')}\, \underbrace{\overline{\xi(s)\,\xi(s')}}_{2\gamma m k_B T\,\delta(s-s')} =$$

$t > t'$

$$= \frac{2\gamma m k_B T}{m^2} e^{-\gamma(t+t')} \underbrace{\int_{-\infty}^{t'} ds'\, e^{2\gamma s'}}_{\left[\frac{e^{2\gamma s}}{2\gamma}\right]_{-\infty}^{t'}} = \frac{\cancel{2\gamma} m k_B T}{m^2}\,\frac{1}{\cancel{2\gamma}}\, e^{-\gamma(t-t')}$$

$\overline{v(t)v(t')} = \frac{k_BT}{m} e^{-\gamma|t-t'|}$

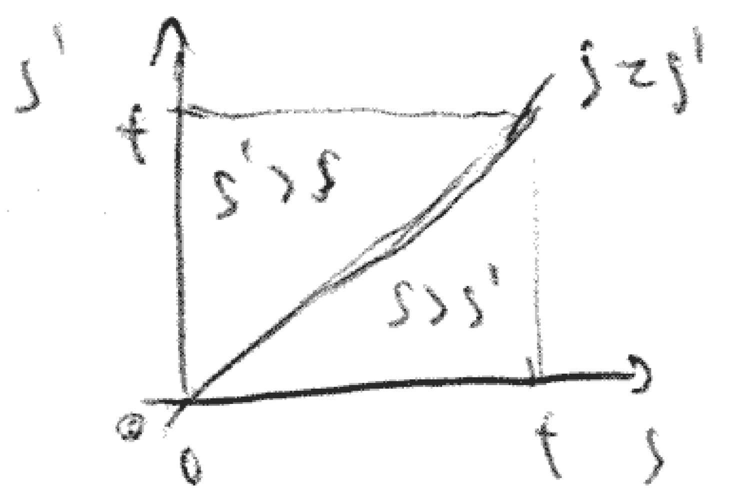


ha $t = t'$ (stac. esetben) $\overline{v(t)^2} = \frac{k_BT}{m}$

$x(t) - x(0) = \int_0^t ds\, v(s)$

$\overline{x(t) - x(0)} = 0$ stac. állapotban

$\overline{(x(t) - x(0))^2} = \int_0^t ds \int_0^t ds' \,\overline{v(s)v(s')} = \frac{k_BT}{m}\int_0^t ds \int_0^t ds'\, e^{-\gamma|s-s'|} =$



$= 2\frac{k_BT}{m}\int_0^t ds \int_0^s ds'\, e^{-\gamma(s-s')} = \%$

$\int_0^s ds'\, e^{\gamma s'} = \left[\frac{e^{\gamma s'}}{\gamma}\right]_0^s = \frac{e^{\gamma s}-1}{\gamma}$

$\% = 2\frac{k_BT}{m}\frac{1}{\gamma}\int_0^t ds\,(1-e^{-\gamma s}) = 2\frac{k_BT}{m}\frac{1}{\gamma}\left[t - \frac{1}{\gamma}\left(1-e^{-\gamma t}\right)\right]$

① $t \ll \frac{1}{\gamma}$ $(\gamma t \ll 1)$ $e^{-\gamma t} \simeq 1 - \gamma t + \frac{1}{2}\gamma^2 t^2$

$\overline{(x(t) - x(0))^2} \simeq 2\frac{k_BT}{m}\frac{1}{2}\frac{1}{\gamma}\gamma^2 t^2 \frac{1}{\gamma} = \frac{k_BT}{m}t^2$

$\overline{(v_0 t)^2} = \overline{v_0^2}\, t^2 = \frac{k_BT}{m}t^2$

~~kezdő~~ kezdősebességekre átlagolva

② $t \gg \frac{1}{\gamma}$ $\gamma t \gg 1$

$\overline{(x(t) - x(0))^2} \simeq 2\frac{k_BT}{\gamma m}t$ Brown-mozgás Diffúziós együtthatója $\left[D = \frac{k_BT}{\gamma m} = \frac{k_BT}{\lambda}\right]$

Einstein-reláció

$D = k_BT\mu$

$m\dot{v} = -\lambda v$ $\dot{v} = -\frac{\lambda}{m}v$

Mozgékonyság

$m\dot{v} = -\lambda v + f$

végsebesség: $v = \frac{1}{\lambda}f$ $\frac{1}{\lambda} = \mu$ mozgékonyság

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$-\lambda v$: Stokes-törvény

$\lambda = 6\pi\eta a$ a: a gömb sugara

$$\overline{\Delta x^2} = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} t$$

Brown mozgás → elektronok vezetés $\dot v = -\gamma v + \frac{\xi}{m} + \frac{eE(t)}{m}$

$$v(t) = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-\gamma(t-t')}\left(\frac{\xi(t')}{m} + \frac{eE(t')}{m}\right)$$

Stac. állapot (kezdeti feltételek eltűnnek, a tagot ki se írtuk)

$$\overline{v(t)} = \frac{e}{m}\int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')} E(t')$$

$$\bar j = e\bar v \underset{\text{sűrűség}}{n} = \frac{ne^2}{m}\int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')} E(t')\,dt'$$

$$\sigma(t) = \frac{ne^2}{m} e^{-\gamma t} \quad (t>0)$$

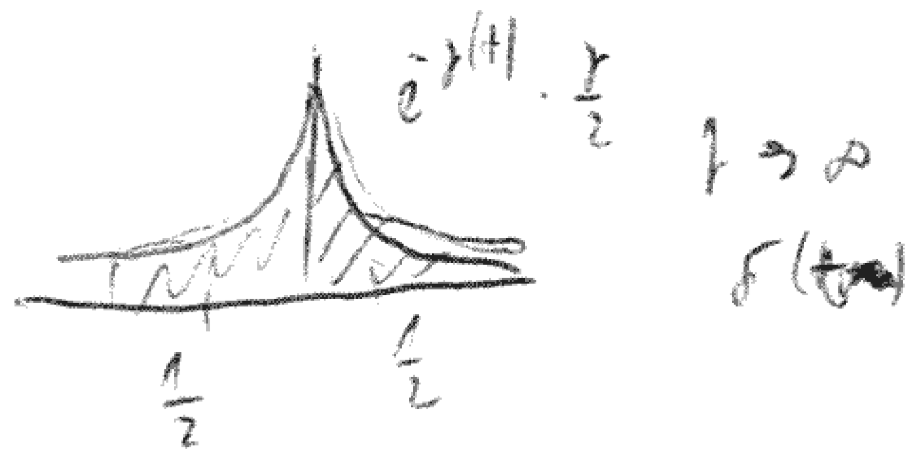
$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\int_0^\infty e^{-\gamma t} e^{i\omega t} dt = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\gamma - i\omega} = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\gamma}\frac{1}{1-\frac{i\omega}{\gamma}}$$

$\frac{1}{\gamma} = \tau$ relaxációs idő

$$\overline{j(t)j(0)} = \overline{\left(\sum_i v_i(t)\right)\left(\sum_j v_j(0)\right) e^2} = \sum_{ij} e^2 \underbrace{\overline{v_i(t)v_j(0)}}_{\delta_{ij}\overline{v(t)v(0)}} = e^2 n\,\overline{v(t)v(0)} = \%$$

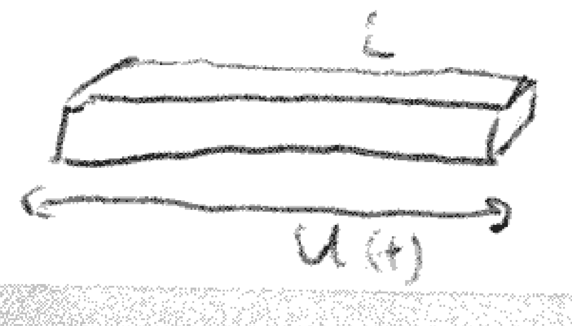
Stac. állapot, $E=0$ — mert a részecskék függetlenek

$$\% = e^2 n \frac{k_BT}{m} e^{-\gamma|t-t'|} = \frac{e^2 n}{m}\frac{1}{\gamma} k_BT\gamma e^{-\gamma|t-t'|} = 2\frac{e^2 n}{m}\frac{1}{\gamma} k_BT \underbrace{\frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-t'|}}_{\substack{\gamma\to\infty\ (\tau\to 0)\\ \delta(t-t')}}$$



$\gamma\to\infty$ $\delta(t)$

alacsony frekvencián: ($\omega \ll \gamma$) $\overline{j(t)j(0)} \approx 2\sigma_0 k_BT\delta(t)$



$\frac{U(t)}{L} = \frac{j(t)}{\sigma_0}$ $U(t) = L\frac{j(t)}{\sigma_0}$ $\overline{U(t)U(0)} = \frac{L^2}{\sigma_0^2}\overline{j(t)j(0)} = \frac{L^2}{\sigma_0^2}2\sigma_0 k_BT\delta(t)$

$$R = \frac{L}{A\sigma_0}$$

$$\overline{U(t)\,U(0)} = L A \cdot \frac{L}{A\sigma_0}\, 2 k_B T \delta(t) = \underbrace{2 V R k_B T \delta(t)}$$

Nyquist-zaj (Johnson-zaj)

lin. oszcillátor T hőmérsékletű környezetben:

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \qquad U(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

$$\dot{p} = -m\omega_0^2 x - \gamma p + \xi \qquad \overline{\xi\,\xi} = 2\gamma m k_B T\, \delta(t-t')$$

→ determinisztikus erő (kényszerítés)

Stacionárius állapot:

$$\boxed{\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega_0^2 x - \gamma \dot{x} + \frac{\xi}{m}} + \frac{f(t)}{m}$$

Fourier-tr. $(i\omega)^2 x_\omega = -\omega_0^2 x_\omega + \gamma i\omega x_\omega + \frac{\xi_\omega}{m} + \frac{f_\omega}{m}$

$$x_\omega = \frac{\frac{\xi_\omega}{m} + \frac{f_\omega}{m}}{\omega_0^2 - i\omega\gamma + (i\omega)^2}$$

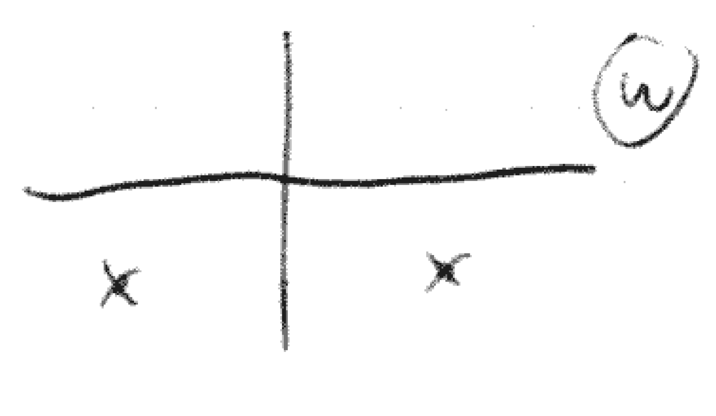
válaszfüggvény:

$$\overline{x_\omega} = \underbrace{\frac{1}{m}\,\frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2}}_{\chi(\omega)} f_\omega$$

pólusok: $\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_0^2 = 0$

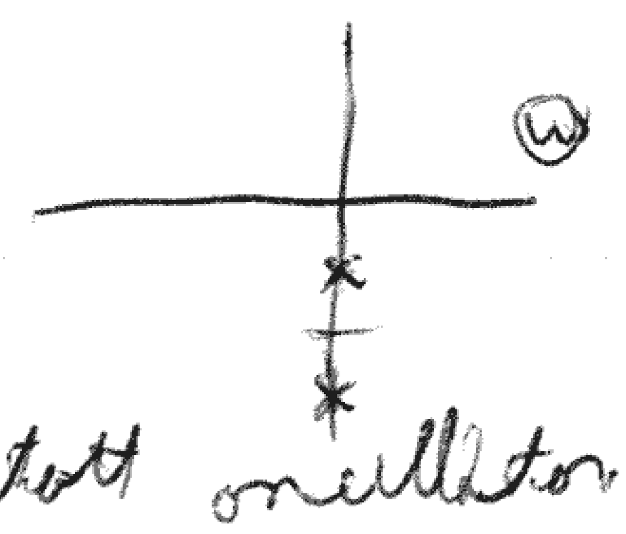
$$\omega = \frac{-i\gamma \pm \sqrt{-\gamma^2 + 4\omega_0^2}}{2} = -\frac{i\gamma}{2} \pm \sqrt{(\omega_0)^2 - \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2}$$

$\omega_0^2 > \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2$



$\omega_0^2 < \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2$

$\omega = -\frac{i\gamma}{2} \pm i\sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2}$



túlcsillapított oszcillátor

$$\overline{x(t)\,x(t')} = C(t-t')$$

$$C(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}\,\tilde{C}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\, e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'}\,\tilde{C}(\omega)\cdot 2\pi\delta(\omega+\omega')$$

$$C(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\, e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'}\, C(\omega,\omega')$$

$$\Rightarrow \boxed{C(\omega,\omega') = 2\pi\delta(\omega+\omega')\,\tilde{C}(\omega)}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$$\overline{\xi(t)\,\xi(t')} = 2\gamma m k_B T\,\delta(t-t')$$

$$\downarrow$$

$$2\gamma m k_B T \cdot 2\pi\,\delta(\omega+\omega') = \overline{\xi_\omega\,\xi_{\omega'}}$$

$$\overline{x_\omega x_{\omega'}} = \frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2}\,\overline{\frac{\xi_\omega}{m}\,\frac{\xi_{\omega'}}{m}}\,\frac{1}{\omega_0'^2 - i\omega'\gamma - \omega'^2} = 2\pi\,\delta(\omega+\omega')\underbrace{\frac{2\gamma m k_B T}{|\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2|^2}}_{\overline{x(t)\,x(0)}\ \text{Fourier-transzformáltja}}$$

$(f_\omega = 0)$

$$\chi = \frac{1}{m}\,\frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega_0}$$

$$\frac{2k_BT}{\omega}\,\mathrm{Im}\,\chi = \frac{2k_BT}{\cancel{\omega}}\,\frac{1}{m}\,\frac{\cancel{\omega}\gamma}{|\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2|^2}$$

Sztochasztikus mezők

hővezetés

$e(\underline{r}, t)$ energiasűrűség

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \underline{j}$$

energiaáram sűrűség

$\underline{j} = -D_T \nabla e$ (konstitúciós egyenlet az irreverzibilis termodin.-ban)

lokális egyensúly:

$de = \rho c \, dT$

fajhő (állandó nyomáson)

$D_T \rho c = \lambda$ (hővezetési együttható)

fluktuációk bevonása:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \underline{j}$$

$\underline{j} = -D_T \nabla e + \underline{\xi}$ fluktuáló energia-áram sűrűség (Gauss-típusú fehér zaj)

$$\overline{\xi_\alpha(\underline{r}, t)} = 0$$

$$\overline{\xi_\alpha(\underline{r}, t)\, \xi_{\alpha'}(\underline{r}', t')} = 2A\, \delta(\underline{r} - \underline{r}')\, \delta(t - t')\, \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\frac{\partial e(\underline{r}, t)}{\partial t} = +D_T \Delta e(\underline{r}, t) - \nabla \underline{\xi}(\underline{r}, t)$$

Fourier tr.: $$\frac{\partial e(\underline{q}, t)}{\partial t} = -D_T q^2 e(\underline{q}, t) - i\underline{q}\, \underline{\xi}(\underline{q}, t)$$

ahol $\overline{\xi_\alpha(q,t)} = 0$, $\overline{\xi_\alpha(q,t)\,\xi_{\alpha'}(q',t')} = \delta_{q,-q'}\, 2A\,\delta(t-t')\,\delta_{\alpha,\alpha'}$

$$\sum_{\alpha,\alpha'} \overline{\left(-iq_\alpha \xi_\alpha(q,t)\right)\left(-iq'_{\alpha'}\xi_{\alpha'}(q',t')\right)} = 2Aq^2\,\delta(t-t')$$

$$\frac{\partial e(q,t)}{\partial t} = -D_T q^2 e(q,t) + \underbrace{\left(-iq\,\xi(q,t)\right)}_{\xi(q,t)}$$

$\overline{\xi(q,t)} = 0$

$\overline{\xi(q,t)\,\xi(q',t')} = 2Aq^2\,\delta(t-t')\,\delta_{q,-q'}$

<u>O-U-folyamat:</u> $\gamma \Updownarrow D_T q^2$ $\quad D \Updownarrow A q^2$

$$e(q,t) = \int_{-\infty}^{t} ds\; e^{-D_T q^2 (t-s)}\, \xi(q,s) \qquad (q \neq 0)$$

$$\overline{e(q,t)\,e(q',t')} = \int_{-\infty}^{t} ds \int_{-\infty}^{t'} ds'\; e^{-D_T q^2 (t-s)}\, e^{-D_T q'^2 (t'-s')}\, \underbrace{\overline{\xi(q,s)\,\xi(q',s')}}_{2Aq^2\,\delta(s-s')\,\delta_{q,-q'}} =$$

$$= \frac{A}{D_T}\, e^{-D_T q^2 |t-t'|}$$

sűrűség

$$\overline{\Delta E^2} = k_B T^2 C = k_B T^2 \rho c V$$

energia fluktuáció $\qquad$ hőkapacitás

$$\overline{\int \delta e(r,t)\,d^3r \cdot \int \delta e(r',t)\,d^3r'} = \int d^3r' \int d^3r\; \overline{\delta e(r,t)\,\delta e(r',t)} = V\,\frac{A}{D_T}$$

ha $t = t'$ $\qquad \overline{e(q,t)\,e(-q,t)} = \frac{A}{D_T}$

$t = t'$ $\quad \overline{e(q,t)\,e(-q,t)} = \frac{A}{D_T}$

$$\overline{\delta e(x,t)\,\delta e(x',t)} = \frac{A}{D_T}\,\delta(x-x')$$

$$\overline{\Delta E^2} = V\frac{A}{D_T} = k_B T^2 \rho c V$$

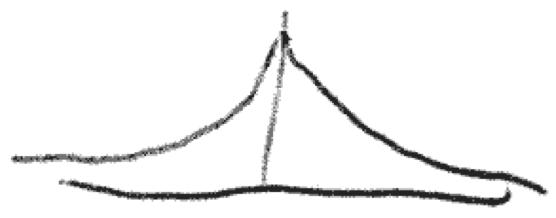
$$\Rightarrow \; A = k_B T^2 \rho c D_T = k_B T^2 \lambda$$

$$\overline{e(q,t)\,e(-q,t')} = k_B T^2 \rho c\, e^{-D_T q^2 |t-t'|}$$

$$e^{-\int d^3x \frac{\delta e(x)^2}{2k_B T^2 \rho c}} \sim P(\delta e(x))$$ ← eloszlás $\delta e(x)$ fluktuációkra

↑ egyensúlyi eloszlásból

$$e^{-\sum_q \frac{\delta e(q)\,\delta e(-q)}{2k_B T^2 \rho c}}$$

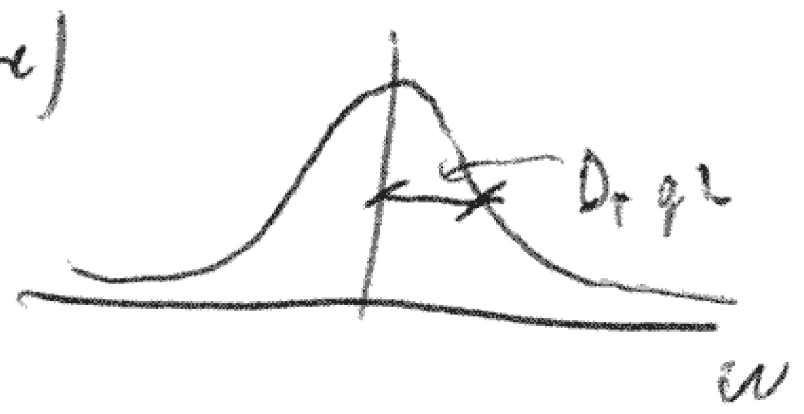


$t' = 0$ (a kezdőpont mindegy)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_T q^2 |t|}\, e^{i\omega t}\, dt \cdot k_B T^2 \rho c = \left(\int_0^{\infty} dt\, e^{-D_T q^2 t}\, e^{i\omega t} + \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{+D_T q^2 t}\, e^{i\omega t} \right) \cdot \text{const} =$$

$$\frac{1}{D_T q^2 - i\omega} \qquad \text{c.c.} \qquad \frac{1}{D_T q^2 + i\omega}$$

$$= k_B T^2 \rho c \left(\frac{2 D_T q^2}{(D_T q^2)^2 + \omega^2} \right)$$ (Lorentz görbe)



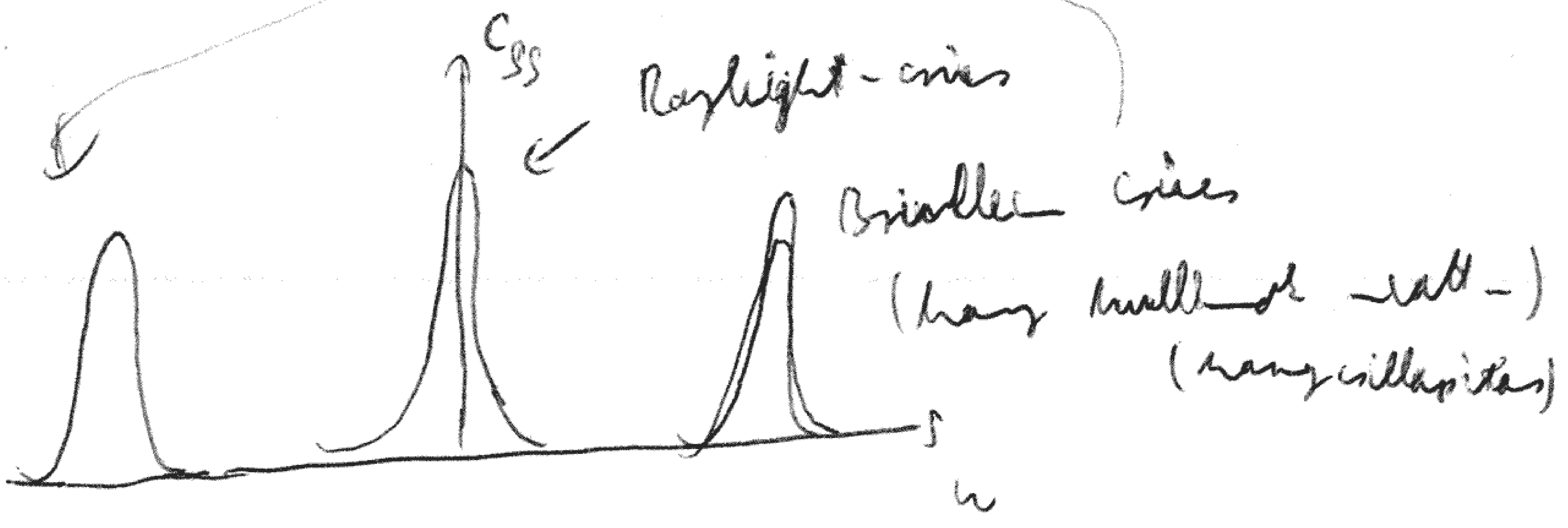
(félérték szélesség)

Mérhetőség → sűrűségingadozások

↓

Rayleigh-csúcs a sűrűségkorrelációs fv-ben

(fényszórás!)



Hajtóerőben lineáris folyamatok

Onsager relációk

Hajtóerő: $X_i = \frac{\partial \phi(\underline{x})}{\partial x_i}$

$\underline{X} = (x_1, \dots x_i \dots x_n)$

$P_s(\underline{x}) = e^{-\phi(\underline{x})}$ (egyensúlyi eloszlás)

(mikrokanonikus sokaság: $\phi = -\frac{S(x)}{k_B}$

kanonikus sokaság: $\phi = \frac{F(x)}{k_B T}$)

$$\dot{x}_i = -\sum_j L_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} + \xi_i$$

kinetikus együtthatók

szimmetrikus, antiszimmetrikus

$$L_{ij} = L_{ij}^{(s)} + L_{ij}^{(as)}$$

$\frac{L_{ij}+L_{ji}}{2}$, $\frac{L_{ij}-L_{ji}}{2}$

$$\overline{\xi_i(t)} = 0$$

$$\overline{\xi_i(t)\,\xi_j(t')} = 2 L_{ij}^{(s)} \delta(t-t')$$

biztosítja, hogy a stacionárius eloszlás $e^{-\phi(\underline{x})}$

mikroszkopikus dinamika: időtükrözésre invariáns

$$\overline{x_i(t)\,x_j(0)} = \underbrace{\varepsilon_i \varepsilon_j}_{} \overline{x_j(0)\,x_i(-t)} = \varepsilon_i \varepsilon_j \overline{x_j(t)\,x_i(0)}$$ (stacionárius állapotban)

± 1 (attól függően, hogy változik-e időtükrözésre)

$$\overline{\dot{x}_i(t)\,x_j(0)} = \varepsilon_i \varepsilon_j \overline{\dot{x}_j(t)\,x_i(0)}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$$-\sum_l L_{il}\,\overline{\frac{\partial\phi}{\partial x_l}(t)\,x_j(0)} + \underbrace{\overline{\xi_i(t)\,x_j(0)}}_{} \overset{t>0}{=} -\sum_l L_{il}\,\overline{X_l(t)\,x_j(0)} \overset{t\to 0}{=} -\sum_l L_{il}\,\underbrace{\overline{X_l(0)\,x_j(0)}}_{\delta_{lj}} = \%$$

$t>0$: függetlenek egymástól $\quad \underbrace{}_{=0}\ \overline{\xi_i(t)}\cdot\overline{x_j(0)} = 0$ egyensúlyi átlag!

$$\overline{X_l\,x_j} = \frac{\int dx_1\ldots dx_n\, e^{-\phi(x)}\,\frac{\partial\phi}{\partial x_l}\,x_j}{\int dx_1\ldots dx_n\, e^{-\phi(x)}} = \delta_{lj}$$

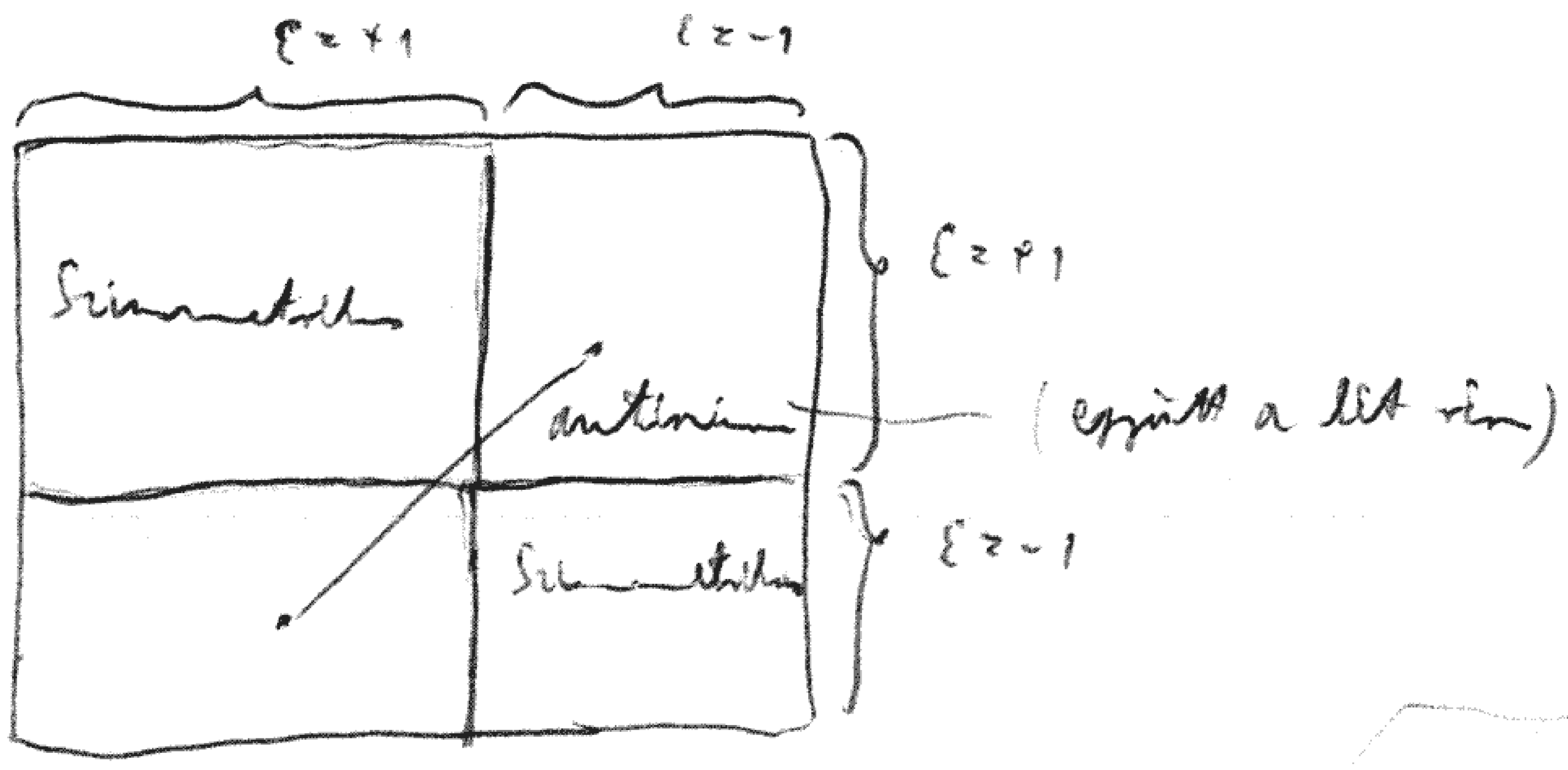
$$\int dx_l\,\underbrace{e^{-\phi(x)}\,\frac{\partial\phi}{\partial x_l}}_{-\frac{\partial}{\partial x_l}e^{-\phi}}\,x_j = \underbrace{\left[-e^{-\phi}x_j\right]_{x_l=-\infty}^{x_l=\infty}}_{} + \int dx_l\,e^{-\phi(x)}\,\underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_l}}_{\delta_{lj}} = \delta_{lj}\int dx_l\,e^{-\phi(x)}$$

természetes határfeltétel
$e^{-\phi}\to 0\ (x_l\to\pm\infty)$

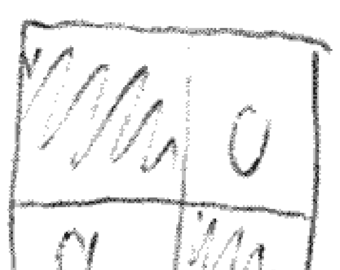
$$\% = -L_{ij}$$

$$-L_{ij} = \varepsilon_i\,\varepsilon_j\,(-L_{ji}) \quad\Rightarrow\quad \boxed{L_{ij} = \varepsilon_i\,\varepsilon_j\,L_{ji}}$$ Onsager relációk

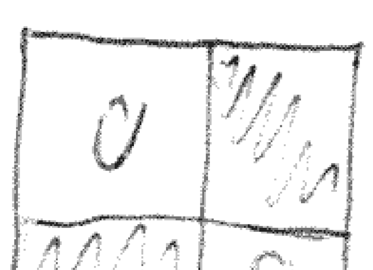
L_{ij} $n\times n$-es mátrix



$$L_{ij} = L_{ij}^{(s)} + L_{ij}^{(as)}$$



disszipatív folyamatok



konzervatív folyamatok

L_{ij} : $\dot{x}_i$-t a $\frac{\partial\phi}{\partial x_j}$-t köti össze

Linearitásnak csak a hajtóerőkben kell lennie!

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

11. előadás (3)

Fázistér: n (egész) | | | | | | | | | | |

$p_1(n,t)$ $\qquad$ $P(n,t|m)$

eloszlás $\qquad$ átmeneti valószínűség

$$p_1(n,t) = \sum_m \underbrace{P(n,t|m)\,p_1(m,0)}_{p_2(n,t,m,0)}$$

Chapman – Kolmogorov:

$$P(n,t|m) = \sum_{m'} P(n,t-t'|m')\,P(m',t'|m)$$

$\Rightarrow$ áttérünk folytonos idejű diffé.-re

$$p_1(n,t+s) = \sum_m \underbrace{P(n,s|m)}_{\delta_{nm} + W_{nm}s + O(s)} p_1(t,m)$$

s-el osztva is 0-hoz tart

$n \neq m$

$W_{nm}s \geq 0$ (átmeneti valószínűség

$n = m$ $\qquad$ $1 + W_{mm}s = 1 - \sum_{\substack{n \\ (n \neq m)}} W_{nm}s$

$\Rightarrow$

$$W_{mm} = -\sum_{\substack{n \\ (n \neq m)}} W_{nm}$$

$$p_1(n,t+s) = p_1(n,t) + \frac{\partial p_1(n,t)}{\partial t}\,s$$

$$\frac{\partial p_1(n,t)}{\partial t} = \sum_m w_{nm} P_1(m,t) = \sum_{\substack{m\\(n\neq m)}} \left(w_{nm} P_1(m,t) - w_{mn} P_1(n,t) \right)$$

Master-egyenlet

diszkrét idejű változat:

$t = l\tau \qquad l = 0,1,2,\dots$

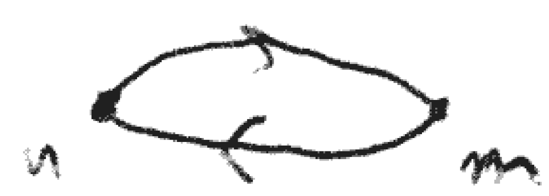
$$P_1(n,(l+1)\tau) = \sum_{m} W_{nm}\, p(m, l\tau)$$

$W_{nm} = P(n,\tau|m)$ $\qquad \sum_n W_{n,m} = 1$ ← sztochasztikus mátrix

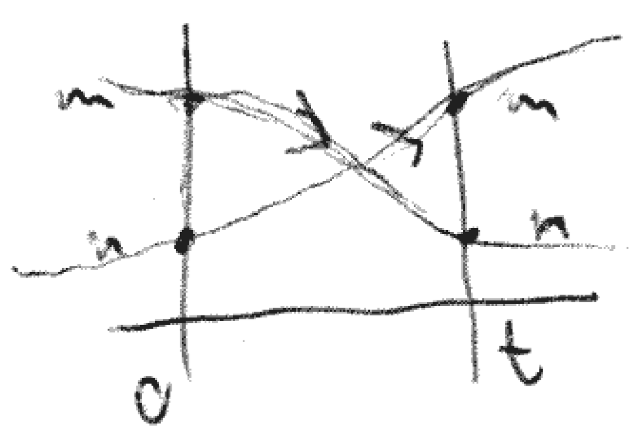
Stacionárius állapot: $p_s(n)$

$$\sum_{\substack{m\\(n\neq m)}} \left(w_{nm} P_s(m) - w_{mn} P_s(n) \right) = 0$$

részletes egyensúly: $w_{mn} P_s(n) = w_{nm} P_s(m)$



Ha a stacionárius állapot időtükrözés invariáns ⇒ részletes egyensúly



$P_2(m,t;n,0)$
$P_2(n,t;m,0)$ ezek egymás időtükrözése ⇒ egyenlőek

$$P(m,t|n)\, P_s(n) = P(n,t|m)\, P_s(m)$$

infinitezimális időben $(t\to 0)$ $\qquad w_{mn}\, p_s(n) = w_{nm}\, p_s(m)$

Tétel: legyen $P_s(n)$ stacionárius eloszlás

feltételek:
- fennáll a részletes egyensúly: $w_{mn} P_s(n) = w_{nm} P_s(m)$
- fázistér nem szeparálható (tetszőleges két állapot között véges sok ~~lépés~~ átmenet kapcsolatot létesít)

↳ Ebben az esetben $P_s(n)$ stabil stacionárius eloszlás

Bizonyítás:

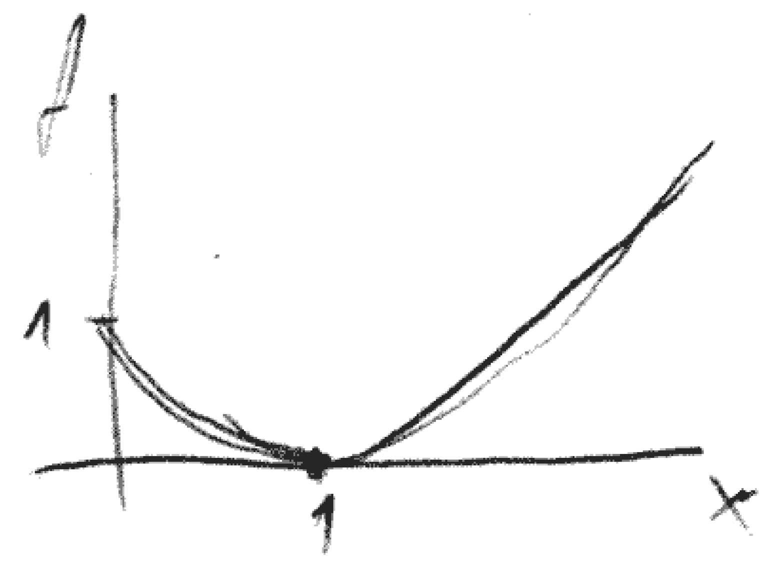
$$H := \sum_n P(n,t) \ln \frac{P(n,t)}{P_s(n)} = \qquad P_s(n) \text{ nem } 0, \quad \lim_{x\to 0} x \ln x = 0$$

$H \geq 0 \Leftarrow$ mert

$$= \sum_n \left(P(n,t) \ln \frac{P(n,t)}{P_s(n)} - P(n,t) + P_s(n) \right) =$$

összegük 1-et ad, tehát különbségük 0

$$= \sum_n P_s(n) \underbrace{\left[\frac{P(n,t)}{P_s(n)} \ln \frac{P(n,t)}{P_s(n)} - \frac{P(n,t)}{P_s(n)} + 1 \right]}_{f := x \ln x - x + 1 \geq 0} \geq 0$$



$f(x=1) = 0$

$f' = \ln x |_{x=1} = 0 \qquad f'' = \frac{1}{x} > 0$

$H \geq 0 \qquad H = 0 \Leftrightarrow \forall$ tagja az összegnek $0 \Longrightarrow \frac{P(n,t)}{P_s(n)} = 1$

$$\dot{H} = \sum_n \left(\ln \frac{P(n,t)}{P_s(n)} + 1 \right) \dot{P}(n,t) = \qquad \sum_n \dot{P}(n,t) = 0 \text{ (normálás egyenletből)}$$

$$= \left(\sum_{\substack{n,m \\ (n\neq m)}} \ln \frac{P(n,t)}{P_s(n)} \left(W_{nm} P(m,t) - W_{mn} P(n,t) \right) + \right.$$

ugyanaz, mint a felső, csak átjelöltük az indexeket

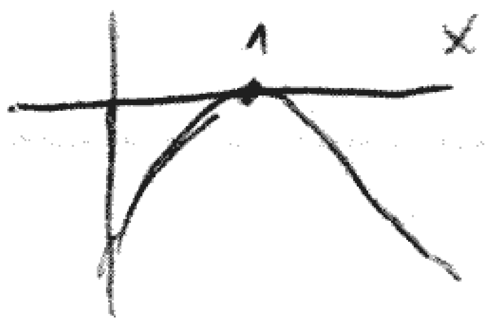
$$\left. + \sum_{\substack{n,m \\ n\neq m}} \ln \frac{P(m,t)}{P_s(m)} \left(W_{mn} P(n,t) - W_{nm} P(m,t) \right) \right) \cdot \frac{1}{2} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ (n\neq m)}} \left[W_{nm} P(m,t) \ln \left(\frac{P(n,t)}{P_s(n)} \cdot \frac{P_s(m)}{P(m,t)} \right) - W_{mn} P(n,t) \ln \left(\frac{P(n,t)}{P_s(n)} \frac{P_s(m)}{P(m,t)} \right) \right]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ (n\neq m)}} W_{nm} P(m,t) \ln \left(\frac{P(n,t)}{P_s(n)} \frac{P_s(m)}{P(m,t)} \right) \left(1 - \frac{W_{mn} P(n,t)}{W_{nm} P(m,t)} \right) \leq 0 \Longrightarrow \ln x (1-x) \leq 0$$

részletes egyensúly miatt: $\frac{W_{mn}}{W_{nm}} = \frac{P_s(m)}{P_s(n)}$

$\ln x \,(1-x) \le 0$, =, ha $x=1$



$\dot H \le 0$, $\dot H = 0 \iff$ -tagonként: $w_{nm} = 0$

vagy $w_{nm} \neq 0$, $\frac{p(n,t)}{p_s(n)} = \frac{p(m,t)}{p_s(m)}$

amiatt, hogy nem szeparálható: $\frac{p(n,t)}{p_s(n)} = C$ $(\forall n\text{-re})$

normálás miatt: $p(n,t) = p_s(n)$

$H \ge 0$, $\dot H \le 0$

H-nak van határértéke, ha $t \to \infty$ $\quad \dot H \to 0$, azaz $H \to 0$

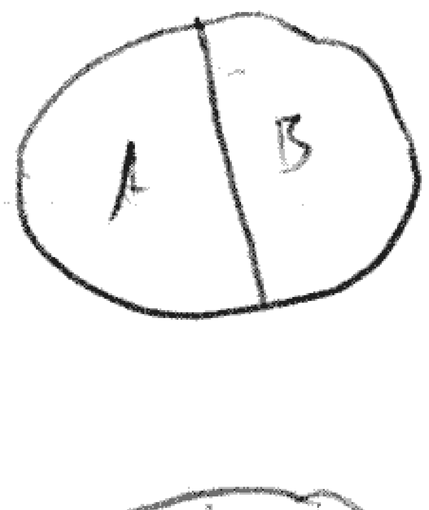
$p(n,t) \to p_s(n)$

H választása is lehet önkényes: $H = \sum_n p_s(n)\, f\left(\frac{p(n,t)}{p_s(n)}\right)$ $\quad \left.\begin{matrix} f(x) \ge 0 \\ f''(x) > 0 \end{matrix}\right\} x > 0$

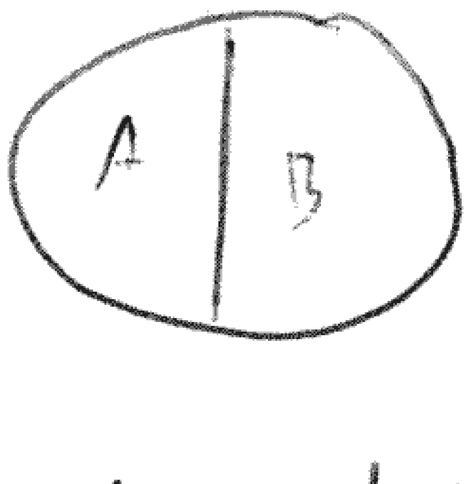
$f(x) = x \ln x$ ← történeti ok (Boltzmann)

← független rendszerekre additív (a H fv.)

← entrópia!



nincs átmenet A és B között (2 független rendszernek fogható fel)
(külön külön kezelhető)



$\left.\begin{matrix} B \to A \text{ átmenet van} \\ A \to B \text{ átmenet nincs} \end{matrix}\right\}$ B kiürül

Zárt rendszer

n: energia állapotok E_n energiáival

$$p_s(n) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E,\delta E)}, & \text{ha } E < E_n < E + \delta E \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

részletes egyensúly: $w_{nm} = w_{mn}$ $\quad (E < E_n,\ E_m < E+\delta E)$

$$H = \sum_n p(n,t)\ln\big(p(n,t)\cdot\Omega(E,\delta E)\big) = \sum_n p(n,t)\ln p(n,t) + \ln\Omega(E,\delta E)\underbrace{\sum_n p(n,t)}_{1}$$

$(E_n \in (E, E+\delta E))$

$$k_B H = \underbrace{k_B \ln\Omega(E,\delta E)}_{S_{\text{mikrokanonikus}}} + \underbrace{k_B \sum_n p(n,t)\ln p(n,t)}_{-S[p(n,t)]}$$

informatikai entrópia

$H \geq 0 \Rightarrow S_{\text{mikrokanonikus}} \geq S[p(n,t)]$

$\dot H \leq 0 \Rightarrow \dot S[p(n,t)] \geq 0$

$t\to\infty \quad H \to 0 \Rightarrow S[p(n,t)] \to S_{\text{mikrokanonikus}}$

Hamilton mechanika esetén ~~...~~ időtükrözési szimmetria miatt $S =$ áll.

Kanonikus sokaság (T hőm. környezet)

$p_s(n) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E_n}$, $\quad \beta = \frac{1}{k_B T}$

$$w_{nm}e^{-\beta E_m} = w_{mn}e^{-\beta E_n} \Rightarrow \frac{w_{nm}}{w_{mn}} = e^{-\beta(E_n - E_m)}$$

$$H = \sum_n p(n,t)\ln\left(p(n,t)\cdot Z e^{\beta E_n}\right) = \sum_n p(n,t)\ln p(n,t) + \ln Z\overbrace{\sum_n p(n,t)}^{1} +$$

$$+\beta\sum_n E_n p(n,t)$$

nemegyensúlyi szabad energia

egyensúlyi szabad energia

$$k_B T H = \bar E[p(n,t)] - T S[p(n,t)] - F_{\text{kanonikus}} = F[p(n,t)] - F_{\text{kanonikus}}$$

$H \geq 0 \quad F[p(n,t)] \geq F_{\text{kanonikus}}$

$\dot{H} \le 0$ $\dot{F}[p(n,t)] \le 0$ $F[p(n,t)] \to F_{\text{kanonikus}}$

<u>MC-eljárás:</u> (Monte-Carlo eljárás)

$P_s(n)$ adott $W_{n,m}$ < részletes egyensúly / nem szeparálható függvény

$$W_{nm} \underset{(n\neq m)}{=} g(m\to n)\, A(m\to n)$$

$g(m\to n)$: átmenet kiválasztása (egyenlő valószínűséggel) (selection)

$A(m\to n)$: elfogadjuk-e az átmenetet (acceptance)

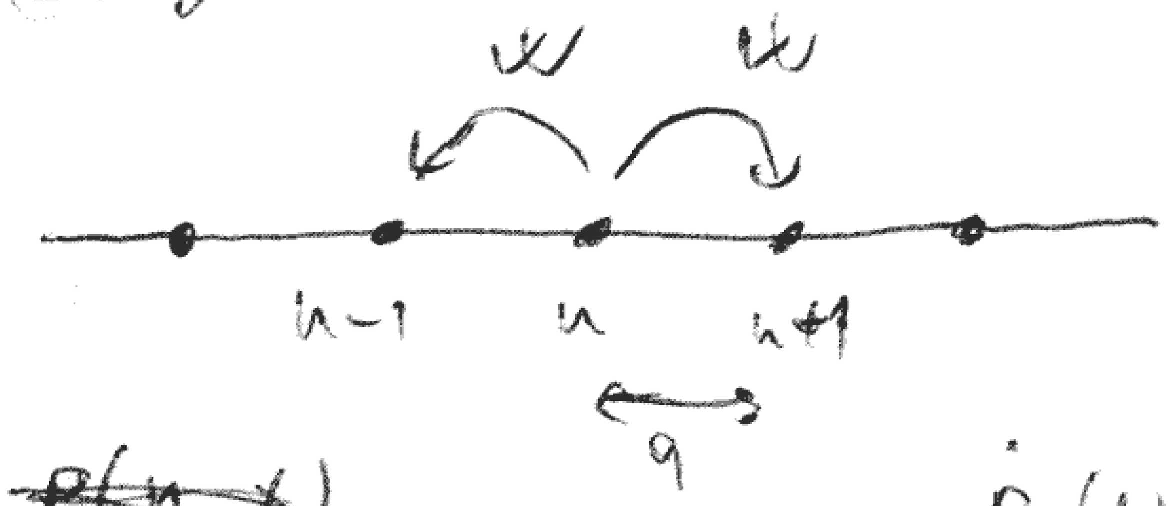
$$\frac{g(m\to n)\, A(m\to n)}{g(n\to m)\, A(n\to m)} = e^{-\beta(E_n - E_m)}$$

<u>Metropolis-algoritmus:</u>

N lehetséges átmenet, $g(m\to n) = \frac{1}{N}$, $A(m\to n) = \begin{cases} 1 & \text{ha } E_n < E_m \\ e^{-\beta(E_n-E_m)} & \text{ha } E_n > E_m \end{cases}$

normálás: $$W_{mm} = 1 - \sum_{\substack{n \\ (n\neq m)}} W_{nm} = 1 - \underbrace{\sum_{\substack{n \\ (n\neq m)}} \frac{1}{N} A(m\to n)}_{<1} > 0$$

Bolyongás



~~$p(n,t)$~~ $$\dot{P}_n(t) = w\left(P_{n+1}(t) + P_{n-1}(t) - 2P_n(t)\right)$$

nemtani lépésre felé ~~[illegible]~~ ⇒ simítja az eloszlást

$$\bar{n}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\, p_n(t)$$

$$\dot{\bar{n}}(t) = \sum_n n\,\dot{p}_n(t) = \sum_n \left(n\, p_{n+1} + n\, p_{n-1} - 2n\, p_n\right) w = w\left(\bar{n} - 1 + \bar{n} + 1 - 2\bar{n}\right) = 0$$

$n = n+1-1$

$n = n-1+1$

$$\boxed{\bar{n}(t) = \bar{n}(0)}$$

$$\overline{n^2}(t) = \sum_n n^2 p_n(t)$$

$$\dot{\overline{n^2}}(t) = \sum_n \left(n^2 p_{n+1} + n^2 p_{n-1} - 2n^2 p_n\right) w = w\left(\cancel{\overline{n^2}} - 2\bar{n} + 1 + \cancel{\overline{n^2}} + 2\bar{n} + 1 - \cancel{2\overline{n^2}}\right) = 2w$$

$n^2 = (n+1-1)^2 = (n+1)^2 - (2n+1) + 1$

$n^2 = (n-1+1)^2 = (n-1)^2 + (2n-1) + 1$

$$\boxed{\overline{n^2}(t) = \overline{n^2}(0) + 2wt}$$

$$\overline{n^2}(t) - \bar{n}^2 = \overline{n^2}(0) - \bar{n}^2(0) + 2wt$$

Spec.: $\bar{n}(0) = 0$ $\quad \overline{n^2}(0) = 0$ $\quad P_n(0) = \delta_{n,0}$ $\quad \Rightarrow \overline{n^2}(t) = 2wt$

$x = na \qquad \bar{x} = 0 \qquad \overline{x^2} = 2wa^2 t \quad \Rightarrow \quad D = wa^2$ (diff. együttható)

$p_n(t) = ?$

$$F(z,t) = \sum_n z^n p_n(t)$$ (feltettük, hogy p_n határérték-függvényként gyorsabban cseng le)

$$\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} = \sum_n \Big(\underbrace{z^n p_{n+1}}_{\frac{z^{n+1}}{z}} + \underbrace{z^n p_{n-1}}_{z^{n-1}\cdot z} - 2 z^n p_n \Big) w = \left(\frac{F(z,t)}{z} + z F(z,t) - 2F(z,t) \right) w =$$

$$= w\left(\frac{1}{z} + z - 2\right) F(z,t)$$

$$\boxed{\begin{aligned} F(z,t) &= F(z,0)\, e^{w\left(\frac{1}{z}+z-2\right)t} \\ F(z,0) &= \sum_n z^n p_n(0) \end{aligned}}$$

$\Rightarrow$ momentumok:

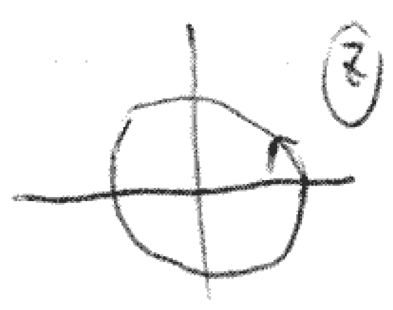
$F(z=1,t) = 1$

$$\left.\frac{\partial F}{\partial z}\right|_{z=1} = \sum_n n p_n = \bar{n}$$

$$\left.\frac{\partial^2 F}{\partial z^2}\right|_{z=1} = \sum_n n(n-1) p_n = \overline{n^2} - \bar{n}$$

$$\frac{1}{\ell!} \left.\frac{\partial^\ell F}{\partial z^\ell}\right|_{z=0} = p_\ell(t)$$

$$p_n(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{F(z,t)}{z^{n+1}}\, dz$$



$p_n(0) = \delta_{n,0}$

$$F(z,0) = \sum_n z^n \delta_{n,0} = 1 \quad \Longrightarrow \quad F(z,t) = e^{-2wt} e^{w\left(\frac{1}{z}+z\right)t}$$

$$p_n(t) = e^{-2wt} \oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{w\left(\frac{1}{z}+z\right)t}}{z^{n+1}} = e^{-2wt} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} i\, d\varphi\, e^{i\varphi} \frac{e^{w\left(e^{-i\varphi}+e^{i\varphi}\right)t}}{e^{i(n+1)\varphi}} =$$

$z = e^{i\varphi} \qquad dz = i e^{i\varphi} d\varphi$

$$= e^{-2wt}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\, \underbrace{e^{in\varphi}}_{\cos(n\varphi)-i\sin(n\varphi)} e^{2w\cos\varphi\cdot t} = e^{-2wt}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\cos(n\varphi)\, e^{2w\cos\varphi\cdot t}\, d\varphi =$$

$$\boxed{= e^{-2wt}\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} d\varphi\, \cos(n\varphi)\, e^{2w\cos\varphi\cdot t} = P_n(t)}$$

módosított Bessel-fv.: $I_n(z) = i^{-n} J_n(iz) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} e^{z\cos\vartheta}\cos n\vartheta\, d\vartheta$

← Bessel fv.

↑ integrál előállítás

$$\boxed{P_n(t) = e^{-2wt} I_n(2wt)}$$

<u>Aszimptotikus formula:</u> $I_n(z) \simeq \frac{e^{z}}{\sqrt{2\pi z}}\left(1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right)$ $\quad (z \gg 1)$

Periodikus határfeltételek

Fourier-tr.: $P_n = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_q e^{iqna} P_q$

$$P_q = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{-iqna} P_n$$

$$q = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N} \quad \left(-\frac{N}{2} \le m < \frac{N}{2}\right) \qquad \left(-\frac{\pi}{a} < q \le \frac{\pi}{a}\right)$$

$$\dot{P}_q = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{-iqna}\, w(P_{n+1}+P_{n-1}-2P_n) =$$

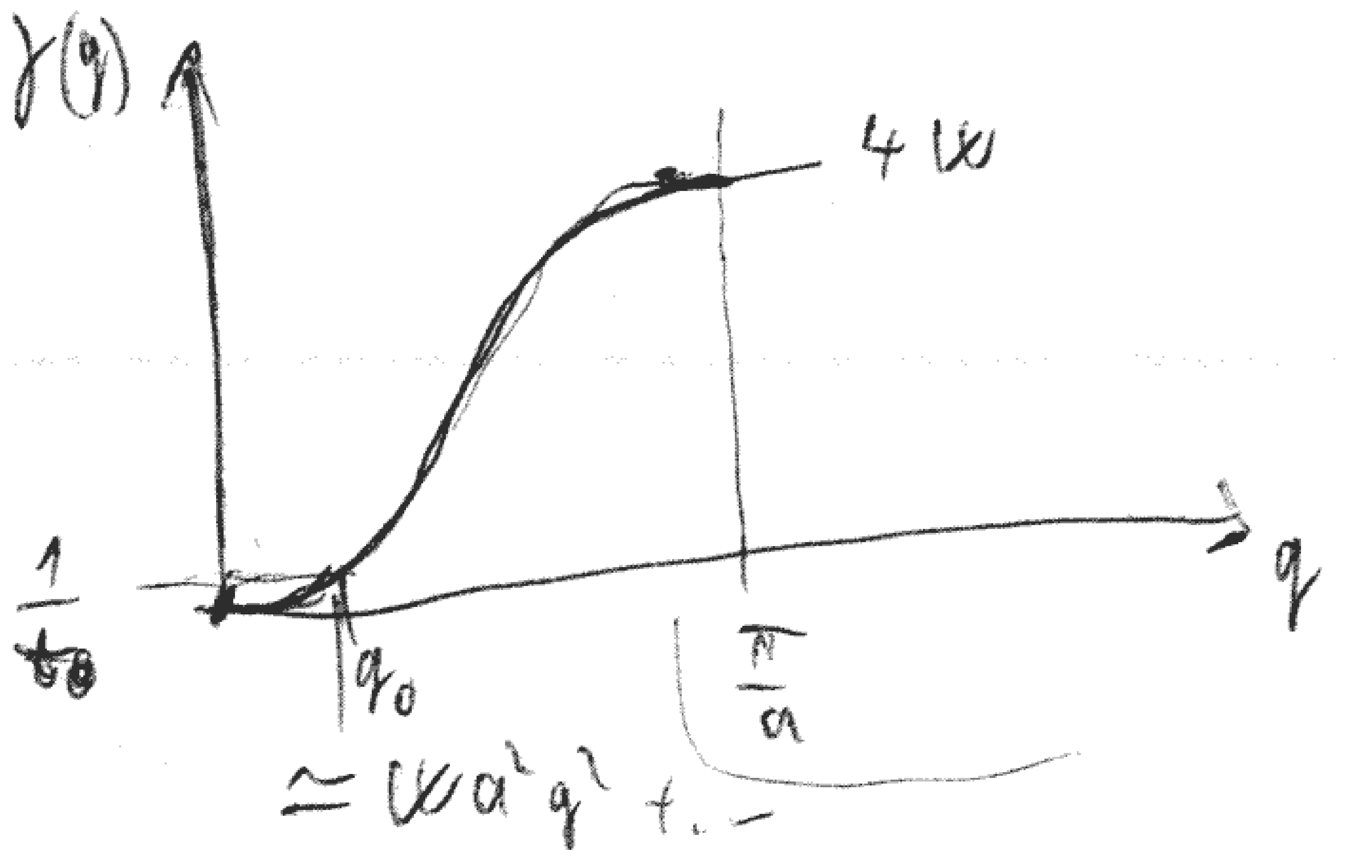
$$e^{-iqna} = e^{-iq(n+1)a} e^{iqa}$$

$$e^{-iqna} = e^{-iq(n-1)a} e^{-iqa}$$

$$= \underbrace{\left(e^{iqa} + e^{-iqa} - 2\right)}_{-2(1-\cos(qa))} P_q w$$

$$\boxed{\dot{P}_q = -\gamma(q) P_q}$$

$$\gamma(q) = 2w(1-\cos(qa)) = 4w\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$



$$P_q(t) = e^{-\gamma(q)t} P_q(0)$$

Spec. $\quad P_n(t=0) = \delta_{n,0}$

$$P_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-iqna} \delta_{n,0} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$$P_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqna} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-\gamma(q)t}$$

határeloszlás: $t \to \infty \quad P_n(t) \longrightarrow \frac{1}{N} \cdot 1$ (egyenletes eloszlás)

$N \to \infty$:
$$P_n(t) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dq\, e^{iqna} e^{-2w(1-\cos(qa))t} \underset{\varphi := aq}{=}$$

$$\sum_q \dots = \frac{Na}{2\pi} \int dq \dots$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\varphi} e^{2wt\cos\varphi}}_{I_n(2wt)} e^{-2wt} = I_n(2wt)\, e^{-2wt}$$

Hosszú idejű viselkedés: relaxációs idő: $\frac{1}{\gamma(q)}$

(Elegendő az életben lévő módusokat figyelembe venni (a többi már lecsengett))

ha $t > t_0$: elegendő a $\gamma(q) < \frac{1}{t_0}$ komponenseket venni $\left(\gamma(q_0) = \frac{1}{t_0}\right)$

$$P_n(t) \approx \frac{a}{2\pi} \int_{-q_0}^{q_0} dq\, e^{+iqna} e^{-wa^2q^2t} \simeq \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq \cos(qna)\, e^{-wa^2q^2t} \simeq \%$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx)\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{-\frac{k^2}{4\alpha}}$$

$$P_n = \frac{a}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{Wa^2t}}\, e^{-\frac{(na)^2}{4Wa^2t}} = a\frac{1}{\sqrt{4\pi W a^2 t}}\, e^{-\frac{(na)^2}{4Wa^2t}}$$ Gauss-eloszlás

$$\overline{(na)^2} = 2Wa^2t \quad \Rightarrow \quad D = Wa^2$$

koszinuszhullámú komponensek → sima függvény → Wiener folyamat
komponensek

$$\dot P_n(t) = W\big(P_{n+1}(t) + P_{n-1}(t) - 2P_n(t)\big)$$ ← második lépés – lépés ≙ diszkrét Laplace-op.

$P_n(t) = a\, F(x=na,t)$ $\quad F(x,t)$ lassan változó fv (a rácsállandó távolságokon)

$$P_{n\pm1}(t) = a\,F(x=na\pm a,t) = a\Big(F(x=na,t) \pm F'(x=na,t)\,a + \frac{1}{2}F''(x=na,t)\,a^2 + \dots\Big)$$

$$\dot P_n(t) = a\,\dot F(x=na,t) = a\big(F''(x=na,t)\,a^2 W\big)$$

$$\boxed{\frac{\partial F(x,t)}{\partial t} = a^2 W \frac{\partial^2 F(x,t)}{\partial x^2}}$$ kontinuum limesz

Anomális diffúzió: pl. ha [illegible] ugrás, ..., nagy lépés ...

Köv. óra: Boltzmann egyenlet (fermion gáz esetén);
egyrészecske kvantumszámok: a $\qquad a = (p, \sigma)$ — imp., spin
betöltési számok: $n_a = 0, 1$

gáz állapotai: $A = \{ \dots n_a \dots \}$

Master egyenlet: $p(A,t)$

$$\frac{\partial p(A,t)}{\partial t} = \sum_{\substack{A' \\ (A' \neq A)}} \Big(W(A,A')\, p(A') - W(A',A)\, p(A,t) \Big)$$

$$\overline{n_k} = ?$$

$$\overline{n_k} = \sum_{A} p(A)\, n_k(A)$$

$$\dot{\overline{n_k}} = \sum_{A} \overline{n_k}(A)\, \dot{p}(A,t) = \sum_{\substack{A,A' \\ (A \neq A')}} \Big(W(A,A')\, P(A')\, n_k A - W(A',A)\, p(A)\, n_k(A) \Big)$$

$$\dot{\overline{n_k}} = \sum_{\substack{A,A' \\ (A \neq A')}} W(A,A')\, p(A') \big(n_k(A) - n_k(A') \big)$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

13. előadás

Boltzmann-egyenlet:

– fermion gáz

$A = \{\ldots\ n_a\ \ldots\}$ a: egyrészecske kvantumszámok pl $a = (p, \sigma)$

$$\dot{P}(A,t) = \sum_{\substack{A' \\ A' \neq A}} \left(W(A,A')P(A',t) - W(A',A)P(A,t) \right)$$ (Master egyenlet

$$\bar{n}_b = \sum_A P(A)\, n_b(A)$$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{A,A' \\ (A \neq A')}} W(A,A')P(A')\left(n_b(A) - n_b(A')\right)$$ csak azok adnak járulékot, ahol növekszik vagy csökken a betöltési szám

$W(A,A') \neq 0$: A, A' egyetlen részecske állapotváltozásával kapcsolódik.

(i)
$$\begin{array}{ccccc} & & b & & a \\ A = \{ & \ldots & 0 & \ldots & 1 \ \ldots \} \\ A' = \{ & \ldots & 1 & \ldots & 0 \ \ldots \} \end{array}$$

$b \to a$

$$n_b(A) - n_b(A') = -1$$

$$-\sum_a W(a,b)\ \sum_{A'} P(A')\left(1 - n_a(A')\right) n_b(A')$$

(ii)
$$\begin{array}{ccccc} & & b & & a \\ A = \{ & \ldots & 1 & \ldots & 0 \ \ldots \} \\ A' = \{ & \ldots & 0 & \ldots & 1 \ \ldots \} \end{array}$$

$a \to b$

$$n_b(A) - n_b(A') = 1$$

$$\left(1 - n_b(A')\right) n_a(A')$$

$$\sum_a W(b,a) \sum_{A'} P(A')\left(1 - n_b(A')\right) n_a(A')$$

részecske a-ból b-be megy

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a) \underbrace{\sum_{A'} P(A')\,(1-n_b(A'))\,n_a(A')}_{\overline{(1-n_b)n_a}} - \sum_{\substack{a \\ a\neq b}} w(a,b) \underbrace{\sum_{A'} P(A')\,(1-n_a(A'))\,n_b(A')}_{\overline{(1-n_a)n_b}}$$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} \left(w(b,a)\,\overline{(1-n_b)n_a} - w(a,b)\,\overline{(1-n_a)n_b} \right)$$

<u>Spec.</u>: szóródás szennyezéseken:

$$w(b,a) = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(\varepsilon_b-\varepsilon_a)\,|\langle b|U|a\rangle|^2 = w(a,b) \quad \text{(időtükrözési szimmetria)}$$

$$\boxed{\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a)\,(\bar{n}_a - \bar{n}_b)}$$

<u>Lezárás szétcsatolással</u>: $\overline{n_b n_a} \approx \bar{n}_b\,\bar{n}_a$ (molekuláris káosz)

(egyenlet nem zárt, ...)

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a)\,(1-\bar{n}_b)\,\bar{n}_a - w(a,b)\,(1-\bar{n}_a)\,\bar{n}_b$$

Klasszikus határeset: $\bar{n}_a \ll 1$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} \left(w(b,a)\,\bar{n}_a - w(a,b)\,\bar{n}_b \right)$$

<u>Két-részecske folyamatok</u>:

$$\begin{array}{rl} & \quad\;\; b \qquad\;\; a_1 \qquad a_2 \qquad a_3 \\ A = \{ & \dots\, 0 \,\dots\, 0 \,\dots\, 1 \,\dots\, 1 \,\dots \} \\ (1) \quad A' = \{ & \dots\, 1 \,\dots\, 1 \,\dots\, 0 \,\dots\, 0 \,\dots \} \end{array}$$

$b, a_1 \Longrightarrow a_2, a_3$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

(ii)
$$A = \{ \ldots 1 \ldots 1 \ldots 0 \ldots 0 \ldots \}$$
$$A' = \{ \ldots 0 \ldots 0 \ldots 1 \ldots 1 \ldots \}$$

$$\dot{n}_\lambda = \sum_{a_1, a_2, a_3} \Big[W(\lambda a_1 ; a_2 a_3) \overline{n_{a_2} n_{a_3} (1-n_\lambda)(1-n_{a_1})} -$$

λ, a_1, a_2, a_3 különbözőnek

$$- W(a_2, a_3 ; \lambda a_1) \overline{n_\lambda n_{a_1} (1-n_{a_2})(1-n_{a_3})} \Big]$$

Boltzmann-egyenlet: (szétesatolással!)

$$\dot{\bar{n}}_\lambda = \sum_{a_1 a_2 a_3} \Big[W(\lambda a_1, a_2 a_3) \bar{n}_{a_2} \bar{n}_{a_3} (1-\bar{n}_\lambda)(1-\bar{n}_{a_1}) -$$

$$- W(a_2 a_3, \lambda a_1) \bar{n}_\lambda \bar{n}_{a_1} (1-\bar{n}_{a_2})(1-\bar{n}_{a_3}) \Big]$$

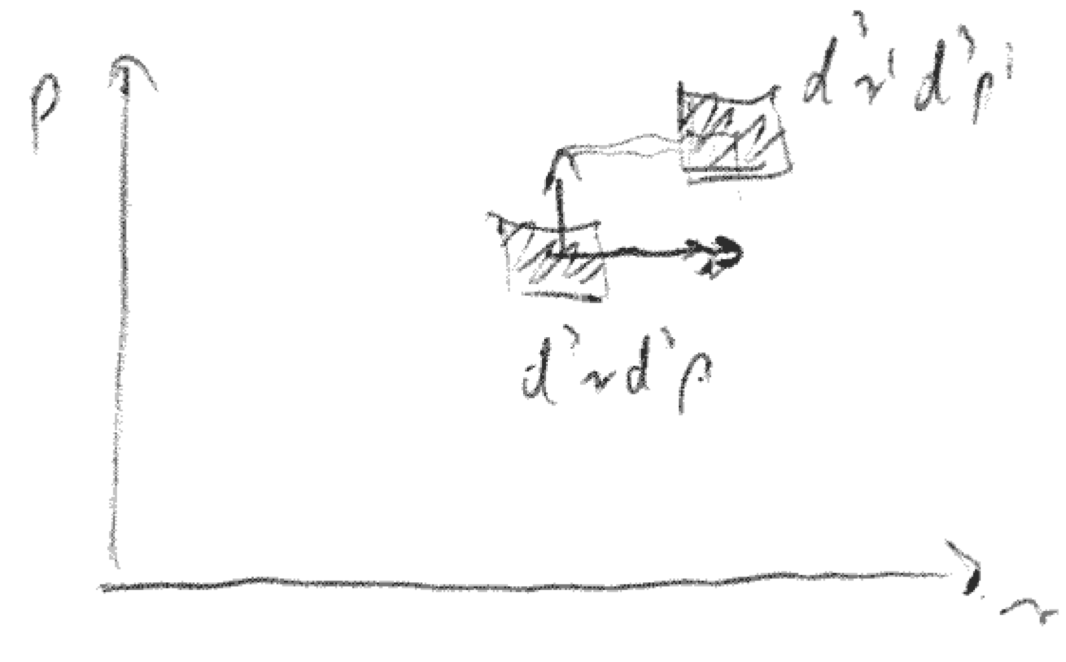
Klasszikus határeset:

$$\dot{\bar{n}}_\lambda = \sum_{a_1 a_2 a_3} \Big[W(\lambda a_1, a_2 a_3) \bar{n}_{a_2} \bar{n}_{a_3} - W(a_2 a_3, \lambda a_1) \bar{n}_\lambda \bar{n}_{a_1} \Big]$$

Inhomogén eset: (+ külső erőtér)

$f(x, p, t)$ eloszlás fv.

$$\int \frac{d^3 p}{(\ldots)} f(x, p, t) = n(x)$$



t+dt

$$f(x, p, t)\, d^3x\, d^3p = f\left(x + \frac{p}{m} dt,\ p + F\, dt,\ t+dt\right) \underbrace{d^3x' d^3p'}$$

Liouville-tétel: egyenlőek

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \cdot \frac{\underline{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} \cdot \underline{F} = 0 \qquad \left(\frac{\partial f}{\partial \underline{r}} = \nabla_r f \; ; \; \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} = \nabla_p f \right)$$

ütközésmentes egyenlet

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \frac{\underline{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} \underline{F} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk.}$$

(↑ eddig ezzel foglalkoztunk)

Pl. klasszikus gáz:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk.} = \int d^3p_1\, d^3p_2\, d^3p_3 \Big[w(\underline{p}\,\underline{p}_1 ; \underline{p}_2 \underline{p}_3)\, f(\underline{r}, \underline{p}_2, t)\, f(\underline{r}, \underline{p}_3, t) - w(\underline{p}_2 \underline{p}_3 ; \underline{p}\,\underline{p}_1)\, f(\underline{r}, \underline{p}, t)\, f(\underline{r}, \underline{p}_1, t) \Big]$$

Relaxációs idő közelítés:

$f_0(\underline{r}, \underline{p}, t)$ stac. megoldás $\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{ütk} = 0$ (homogén eset, külső erő nélkül)

$$f = f_0 + g$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk} \simeq -\frac{g}{\tau} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

(f exponenciálisan tart f_0-hoz)

$\boxed{\text{pl}}$ **Elektromos vezetés:**

$f_0(\varepsilon(p)) \qquad \varepsilon = \frac{p^2}{2m}$

Stac. térben, homogén megoldás: $\underbrace{-e\underline{E}}_{\underline{F}} \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{p}} = \frac{\underline{p}}{m} = \underline{v}$$

gyenge tér: $\underline{E}$-ben legalacsonyabb rendben

$$-e\underline{E} \frac{\partial f_0}{\partial \underline{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \qquad f = f_0 + e\tau \underline{E} \frac{\partial f_0}{\partial \underline{p}} = f_0 + e\tau \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} (\underline{v}\,\underline{E})$$

$$\underline{j} = -e\overline{\underline{v}} = -e \int d^3p\, f(\underline{p}) \frac{\underline{p}}{m}$$

Nemegyensúlyi statisztikus fizika

$$\underline{j} = -e\underbrace{\int d^3p\, f_0(\varepsilon(p))\,\frac{p}{m}}_{=0} - e^2\tau\int d^3p\,\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\,(\underline{v}\,\underline{E})\,\underline{v}$$

(egyensúlyi eset, izotróp, –)

$$\underline{j} = \underline{\underline{\sigma}}\,\underline{E} \qquad j_\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}E_\beta$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2\tau\int d^3p\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)v_\alpha v_\beta$$

Klasszikus részecskerendszer: (Drude-modell)

$$f_0 = n\,C\,e^{-\frac{p^2}{2mkT}}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} = -\frac{1}{kT}f_0 \qquad \sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2\tau}{kT}\underbrace{\int d^3p\, f_0\, v_\alpha v_\beta}_{n\cdot\overline{v_\alpha v_\beta} = n\cdot\delta_{\alpha\beta}\overline{v_\alpha^2} = n\frac{k_BT}{2}} = \frac{e^2 n\tau}{m}\delta_{\alpha\beta}$$

$$\frac{m\overline{v_\alpha^2}}{2} = \frac{k_BT}{2}$$

$\boxed{\text{II 2}}$ Degenerált elektrongáz: $\tau(\varepsilon)$

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2\int d^3p\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)v_\alpha v_\beta\,\tau(\varepsilon) = e^2\int dp\,p^2\int d\Omega\left(\frac{v_\alpha v_\beta}{v^2}\right)v^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\tau(\varepsilon) = \%$$

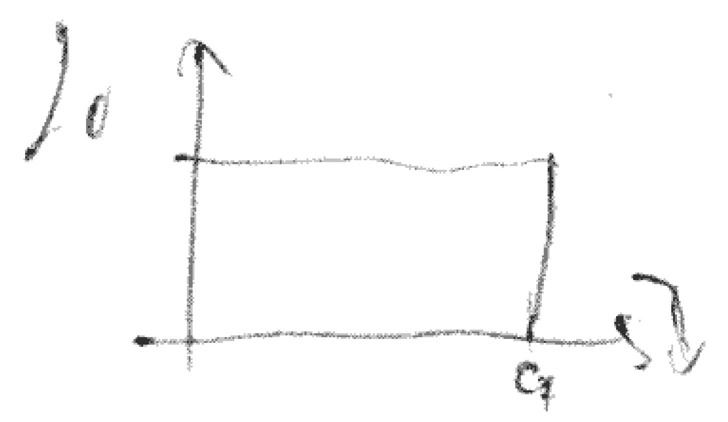
$$\int d\Omega\,\frac{v_\alpha v_\beta}{v^2} = \delta_{\alpha\beta}\,\frac{1}{3}\,4\pi \quad\Big|\quad \% = e^2\,\delta_{\alpha\beta}\,\frac{4\pi}{3}\int dp\,p^2\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\tau(\varepsilon)\left(\frac{p}{m}\right)^2 = \%$$

$v_z = v\cos\vartheta$
$v_x = v\sin\vartheta\cos\varphi$
$v_y = v\sin\vartheta\sin\varphi$

$\frac{v_z^2}{v^2} = \cos^2\vartheta$ iránytól független [illegible]

$$\int dp\,4\pi p^2 = \int d\varepsilon\,\underbrace{D(\varepsilon)\cdot\frac{h^3}{2}}_{d(\varepsilon)}$$

$$\% = e^2\,\delta_{\alpha\beta}\,\frac{1}{3}\int d\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\tau(\varepsilon)\,\frac{\varepsilon}{m}\,d\varepsilon = *$$



$\to \delta(\varepsilon-\varepsilon_f)$

$$* \; \sigma_{\alpha,\beta} \frac{e^2}{m} \frac{1}{3} \tau(\varepsilon_F)\, d(\varepsilon_F)$$