09.16.

pert. számítás ⟶ lineáris válasz elmélete

fizikai mennyiség várható értéke

korreláció, függvény

szabadsági fokok

relaxálására ( tőlki szabadsági fok = zaj pl: linearizáljuk a mérőpont körüli változást: zaj

makroszkópikus változók

inverzibilis termodinamika.

sztochasztikus folyamatok.

kinetikus elmélet ⟶ Boltzmann egyenlet

eltérés kis relaxálására

reverzibl változóra

számítógépes szimuláció

---

lineáris válasz




$B(t)$ fizikai mennyiség (mérjük)

zavar $f(t)$

zavar nélkül $B = \text{áll}$ legyen $0$

pl:

zavar mágneses tér: $f(t)$

mágnesezettséget mérjük $M(t)$

stacionárius állapot megzavarására

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

↑ lineáris válasz

lineáris összefüggés fen

kauzalitás:

$\chi(t,t') = 0$ ha $t' > t$

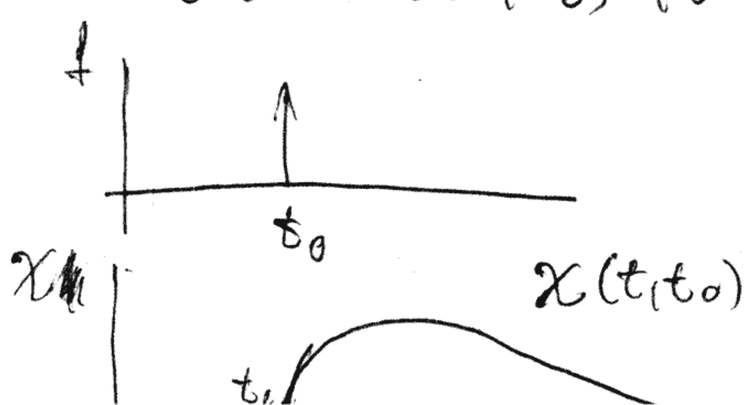
stacionárius állapot megzavarására:

mindegy mikor ez a hatás.

$$\chi(t,t') = \chi(t-t')$$

ment $f(t) = f_0 \delta(t-t_0)$

$B(t) = \chi(t,t_0) f_0$



pert. számítás ⟶ lineáris válasz elmélete

fizikai mennyiség várható értéke
korreláció, függvény

szabadsági fokok
redukálása ( többi szabadsági fok = zaj  pl: kinagadjuk a mérőpontot vagy nem: zaj

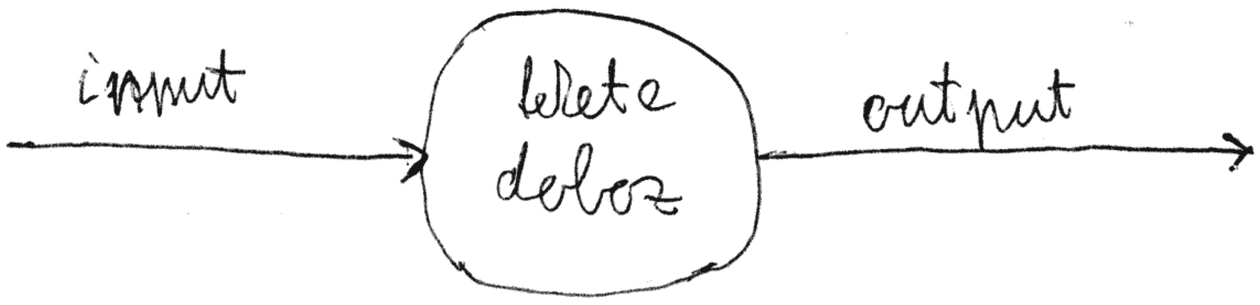
↘ makroszkópikus változók
inverzibilis termodinamika.

↘ sztochasztikus folyamatok.

kinetikus elmélet ⟶ Boltzmann egyenlet
elenyésző kis redukálása
kevesebb változóra

számítógépes szimulációk

lineáris válasz




$B(t)$ fizikai mennyiség (mérjük)

zavar $f(t)$

zavar nélkül $B = \text{áll}$ legyen $0$

pl:
zavar mágneses tér: $f(t)$
mágnesezettséget mérjük $M(t)$

stacionárius állapat megzavarása

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

↑ lineáris válasz
lineáris összefüggés fen

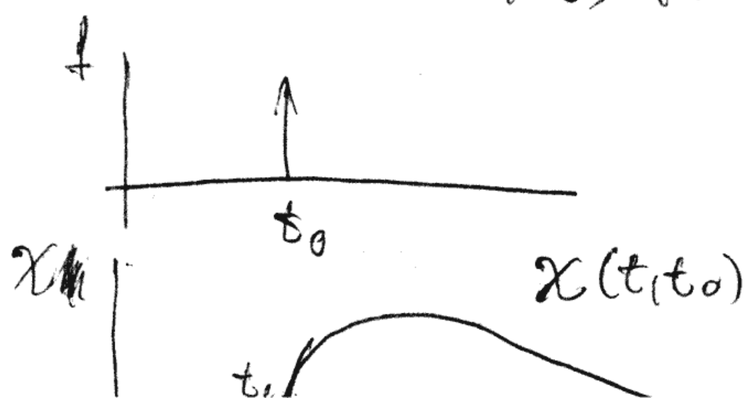
kauzalitás:

$\chi(t,t') = 0$ ha $t' > t$

stacionárius állapot megzavarása:
mindegy mikor ez a. a hatás.
⇓
$\chi(t,t') = \chi(t-t')$

mert $f(t) = f_0 \delta(t-t_0)$

$B(t) = \chi(t,t_0) f_0$



$$B(t) = \int_{-\infty}^{t} \chi(t-t')\, f(t')\, dt' = \int_{0}^{\infty} \chi(\tau)\, f(t-\tau)\, d\tau$$

$t - t' = \tau$

monokromatikus gerjesztés

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

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

$B_\omega = f_\omega \chi_\omega$

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

Bármely $t$ valós $\rightarrow$ $\chi(t)$ valós

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

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{Re}\,\chi(\omega) &= \mathrm{Re}\,\chi(-\omega) \\ \mathrm{Im}\,\chi(\omega) &= -\mathrm{Im}\,\chi(-\omega) \end{aligned}\right\}$$

Fourier trafó komplex frekvenciákra kiterjeszthető.

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

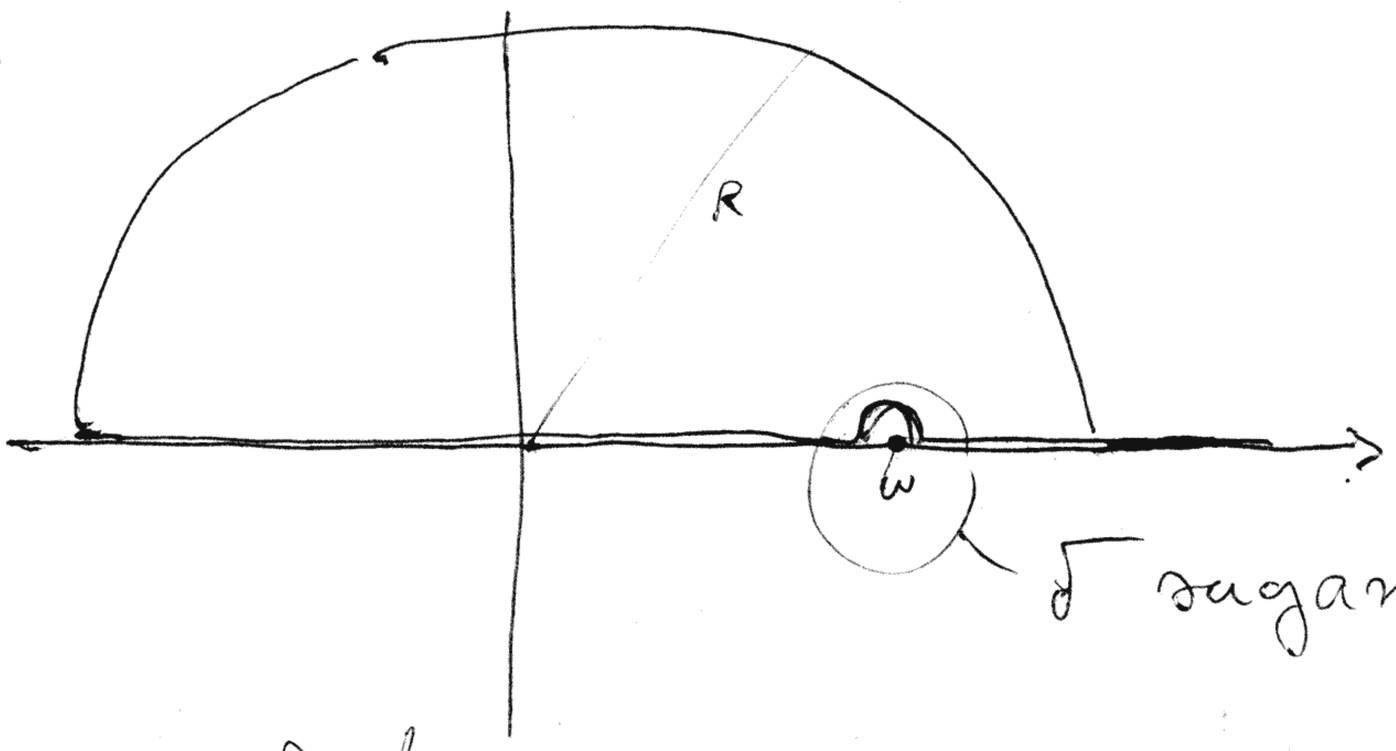
$$e^{iz\tau} = e^{i\,\mathrm{Re}\,z\,\tau}\, e^{-\mathrm{Im}\,z\,\tau}$$

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

- Akkor is létezik amikor a valós tengelyen nem. Azért félsíkon az exp. növekedés miatt az alsó félsíkon nem létezik.
Analitikus folytatás, lehetséges az alsó félsíkra.

# Kramers – Kronig relációk

$$\oint_C \frac{\chi(z)}{z-w}\,dz = 0 \qquad \leftarrow \text{mert bent analitikus.}$$







tegyük fel: $\chi(z) \to 0$ ha $z \to \infty$

Ekkor a körön vett integrál eltünik ha $R \to \infty$.

$$0 = \int_{-\infty}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\,d\omega' + \int_{\omega+\delta}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega'-\omega}\,d\omega' + \int_{+\pi}^{0} \frac{\chi(\omega+\delta e^{i\varphi})}{\delta e^{i\varphi}}\, i\delta e^{i\varphi}\,d\varphi$$

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

$\delta \to 0 \qquad -i\chi(\omega)\pi$

Kétértelmű integrál

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

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

Bontsuk fel valós és képzetes részre.

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

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

Hilbert – transzformált

- Következtetés: nem lehet $\equiv 0$ az Im. rész, van kázis tele.

Titchmarsh – tétel: ez a 3 állítás

Kauzalitás $\Rightarrow$ $\chi(t) = 0$ $(t<0)$

$\Downarrow$

$\chi(z)$ analitikus a felső félsíkon + $\chi(z) \to 0$

$\Downarrow$

Kramers Kronig relációk

Hatásvázlás-tétel

## Hamilton-i dinamikájú rendszerek

$H(t)$ időfüggő Hamilton-i.

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

Kezdeti feltétel: $\Psi(t_0) = \Psi_0$

lineáris kapcsolat $\Psi(t) = \hat{U}(t,t_0)\,\Psi(t_0)$

↑ unitér operátor

mert → $i\hbar \frac{d}{dt}(\Psi', \Psi) = i\hbar(\dot{\Psi}', \Psi) + i\hbar(\Psi', \dot{\Psi}) = -(H\Psi', \Psi) + (\Psi', H\Psi) = 0$ ← mert önadj

$(U(t,t_0)\Psi_0, U(t,t_0)\Psi_0) = (\Psi_0, \Psi_0)$

$(\Psi_0, U^+(t,t_0)U(t,t_0)\Psi_0) = (\Psi_0, \Psi_0)$ $\quad \forall \Psi_0$-ra

$\Downarrow$

$U^+ U = \mathbb{1}$

$i\hbar \dot{\Psi} = i\hbar \dot{U}(t,t_0)\Psi_0 = H\,U(t,t_0)\Psi_0$ $\quad \forall \Psi_0$

$\Downarrow$

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

Kezdeti feltétel: $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$

H független időtől

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

időfüggő eset: $H + V(t)$ ← időfüggő, perturbáció. ↖ időfüggetlen

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

Kezdeti feltétel: $S(t_0,t_0) = \mathbb{1}$

- ha $V = 0$ akkor $S \equiv \mathbb{1}$ kell legyen

$S$ egységtől való eltérése mutatja a pert. hatását.

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

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

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

$$H\,U(t,t_0)\left(-\frac{i}{\hbar}\right) \qquad +V\,U(t,t_0)\left(\frac{i}{\hbar}\right)$$

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

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

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

0. rend $\quad S(t,t_0) = 1$

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

<u>lineáris változás</u>

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

↓ — zavaró erőmező.

↑ rendszer lineáris mennyisége (operátor)

→ Elhanyagolják a rendszer időfejlődését a perturbáló rendszerre.

→ a külső rendszert nem is kvantálják.

nl:
- $\underline{\underline{P}}\;\underline{E}(t)$
- $\underline{\underline{M}}\;\underline{H}(t)$

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

---

Valójában ez csúcsos operátorinverz a

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

- $\sum_\alpha p_\alpha = 1$

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

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

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

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

Vissza a lineáris válaszhoz.

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

Kezdetben ($t_0$-ban) termikus egyensúly

$$\rho(t_0) = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \qquad Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

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

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

$$= \mathrm{Tr}\left(\underbrace{\frac{e^{-\beta H}}{Z}\,e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,B\,e^{\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right)}}_{\langle B\rangle_0}\right) + \mathrm{Tr}\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[B(t),A(t')\right]f(t')\,dt'\,\frac{e^{-\beta H}}{Z}\right)$$

$\langle B\rangle_0$ az egyensúlyi átlag

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

$$\langle B_t\rangle = \langle B_0\rangle + \int_{t_0}^{t}\varphi_{BA}(t,t')\;f(t')\,dt'$$

$t_0 \longrightarrow -\infty$ „régi volt egyensúly"

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

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

$t \to -\infty$ termikus egyensúly $\rho_0 = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$

Perturbáció: $\delta H = -A f(t)$

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

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

időeltolás invariancia $\Rightarrow$ csak az idő különbségtől függ, tetszőleges tetszőleges:

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

monokromatikus zavar: $f(t) = f_0 e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t}$ $\quad (\varepsilon \to 0$ a zárómolás végén)

Adiabatikus lekapcsolás.

$$\langle B \rangle_t = \int_0^\infty \chi_{BA}(\tau) f(t-\tau) d\tau =$$

$$= \int_0^\infty f_0 e^{-i\omega(t-\tau)} e^{\varepsilon t} \varphi_{BA}(\tau) e^{i\omega t} e^{-\varepsilon \tau} d\tau = f_0 e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t} \int_0^\infty \varphi_{BA}(\tau) e^{i\omega\tau - \varepsilon\tau} d\tau$$

$\int_0^\infty \varphi_{BA}(\tau) e^{i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau$ komplex függvény típusú: $\chi_{BA}(z)\big|_{z=\omega+i\varepsilon}$

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

**Kl**: lineáris oszillátor

$$H' = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2}_{H} - x f(t)$$

$H$ perturbálatlan

perturbáció
$f(t)$ kényszererő reprezentációja

Válasz: $\langle X \rangle_t = \int_{-\infty}^{t} \varphi(t-t') f(t') dt'$

$\varphi_{xx}(t) \overset{\text{jel}}{=} \varphi(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [x(t), x(0)] \rangle$

időfüggő

Kinálmelyik $x$

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

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

$[p, x] = \frac{\hbar}{i}$

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

Ehrenfest-tétel?

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

$$\begin{cases} t=0 & x = x(0) \\ & \dot{x} = \frac{p(0)}{m\omega_0} \end{cases}$$

Kezdeti felt.
$x(0)$ $p(0)$ az Schrödinger kép operátorai.)

$$[x(t), x_0] = \frac{[p(0), x(0)]}{m\omega_0}\sin(\omega_0 t)$$

$t/i$

$$\varphi(t) = \frac{\sin(\omega_0 t)}{m\omega_0}$$

~ Fourier-transzformált:

$$\int_0^\infty \frac{\sin(\omega_0 t)}{m\omega_0} e^{i\omega t} dt$$

így nem létezik.

csak $\operatorname{Im} z > 0$ félsíkon létezik

$$\int_e^{\infty} \frac{x_{in}(\omega_c t)}{m\omega_c} e^{izt}\,dt = \frac{1}{m\omega_c}\frac{1}{2i}\int_0^{\infty} e^{-i\omega_0 t} + e^{i\omega_0 t}\, e^{izt}\,dt =$$

$\Im m z > 0$

$$= \frac{1}{2im\omega_0}\left[\frac{e^{i(\omega_c+z)t}}{i(\omega_c+z)} - \frac{e^{+i(+\omega_0+z)t}}{i(+\omega_c+z)}\right]_0^{\infty} =$$

$$= \frac{1}{2im\omega_0}\left(+\frac{1}{i(z-\omega_0)} - \frac{1}{i(z+\omega_0)}\right) = \frac{1}{2m\omega_0}\left(\frac{-1}{z-\omega_0} + \frac{1}{z+\omega_0}\right)$$

$\uparrow$ $\qquad$ $\downarrow\uparrow$

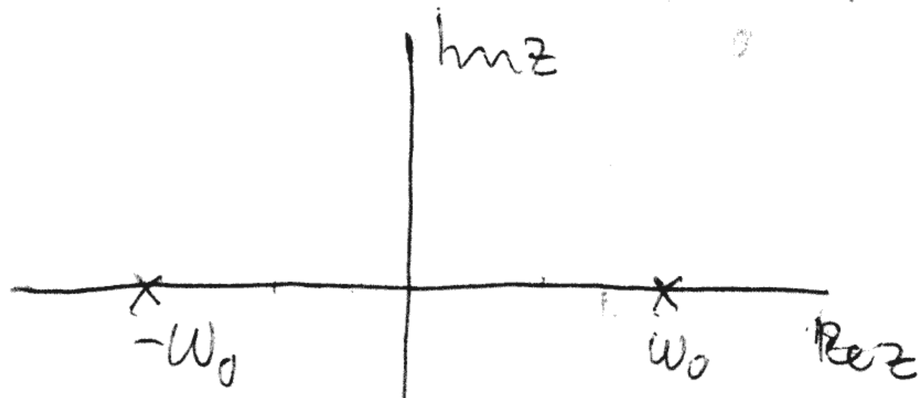
$\frac{x_{in}(\omega_0 t)}{m\omega_0}$ $\qquad$ $\chi(z)$

Fourier transzformált

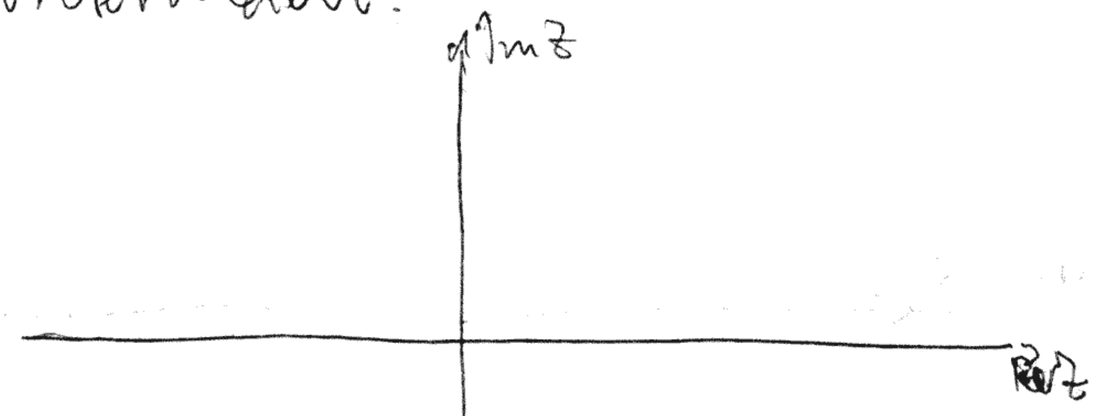
$\Im m z > 0$

Az eredmény az egész $\mathbb{C}$-n értelmes.

mérőmű függvény: csak pólusai vannak.




Hogyan lehet valós idejű válasz fgv-ét vissza transzformálni.




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

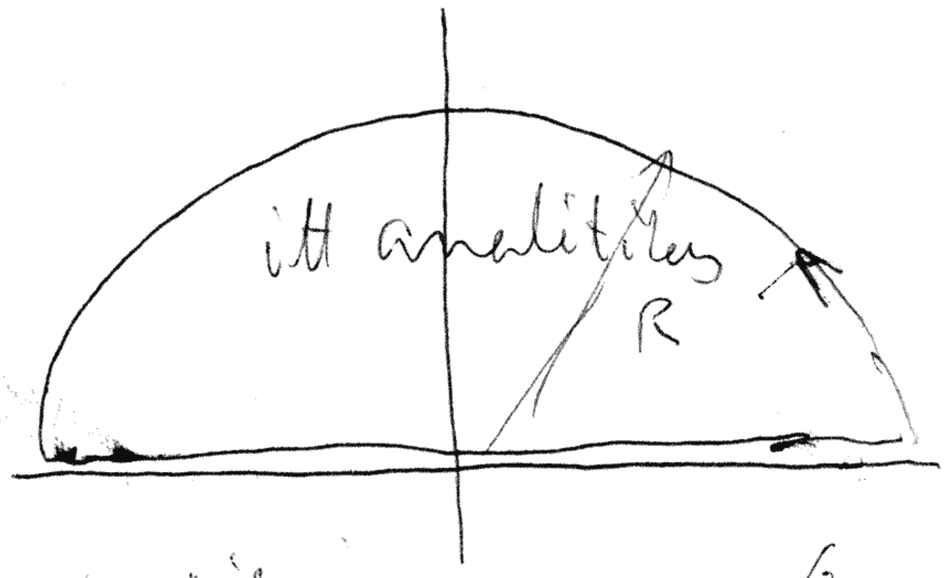
$\underline{t<0}$: $\quad e^{-izt} = e^{-i\,Re\,z\,t}\, e^{Im\,z\,t}$

$|z|\to\infty$ $\quad Im\,z \to \infty$

ha $t<0$

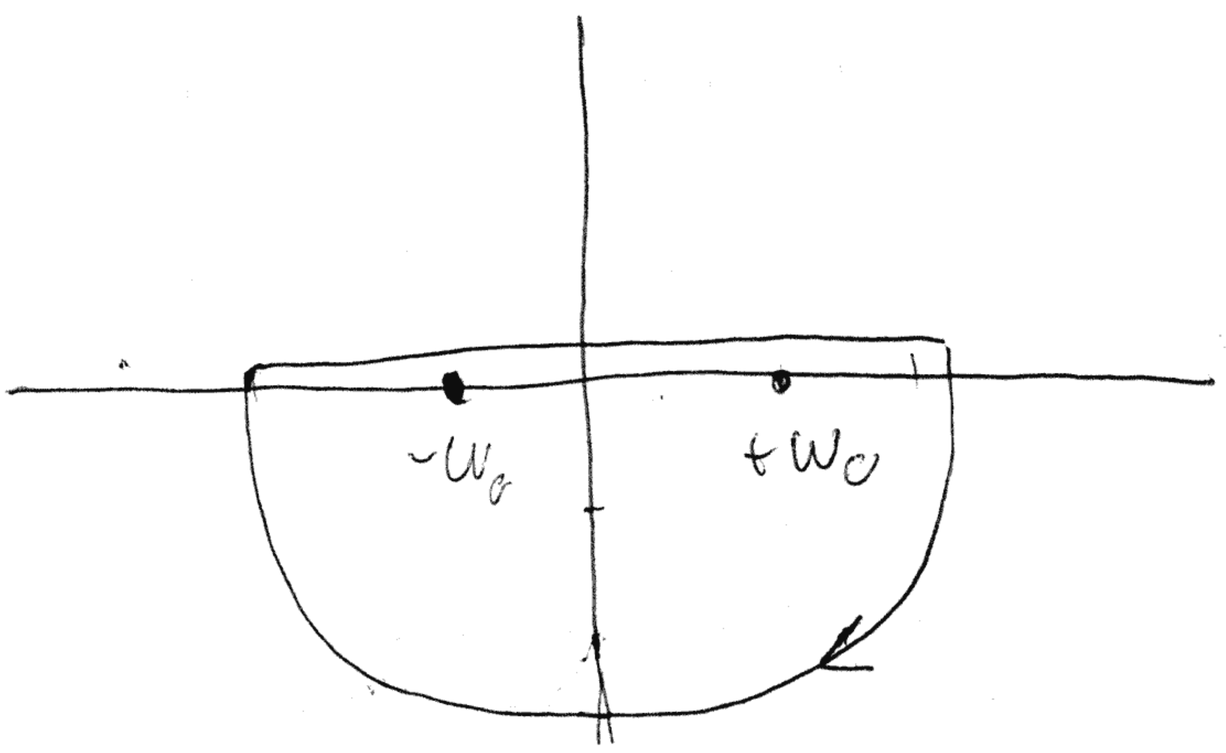
$\downarrow$

a felső félsíkon lesz határ az integrál.




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

$t>0$ $\quad$ $\text{Im}\, z<0$ $\quad$ az alsó félsíkon lehet lezárni




$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} \chi(z)\, e^{-izt}\, dz = \oint_C \chi(t)\, e^{-izt}\, dz = \frac{+2\pi i}{2\pi}\left(\frac{1}{2m\omega_0} e^{-i\omega_0 t} + \left(-\frac{1}{2m\omega_0}\right) e^{i\omega_0 t}\right)$$

$$= \frac{1}{m\omega_0}\sin\omega_0 t$$

A rezonanciánál a legtöbb átmenetet energiája felett vesz.

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

↑ energia sajátállapotaival reprezentálom a nyomot.

$$\boxed{H \phi_n = E_n \phi_n}$$

$$\hat{A} \longrightarrow (\phi_n, A \phi_m) = \langle n | A | m \rangle = A_{nm}$$

$$= \frac{i}{\hbar} \sum_n \langle n | \frac{e^{-\beta H}}{Z} (B(t) A - A B(t)) | n \rangle =$$

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

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

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

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

Tanuljuk tudni megoldani a kétszeres integrálokat.

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

$$\int_0^\infty \chi_{BA}(t) e^{i z t} dt = \int_0^\infty \varphi_{BA}(t) e^{i z t} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \cdot$$

$$\cdot \frac{\langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle}{z - \omega_{mn}} = \chi_{BA}(z) \qquad \mathrm{Im}\, z > 0$$

(1) Az egyen $z$ adott értelmes függvény
(2) amennyi függvény: csak nekik singularitásuk.

$z = \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n)$ : a gerjesztési hullámok.

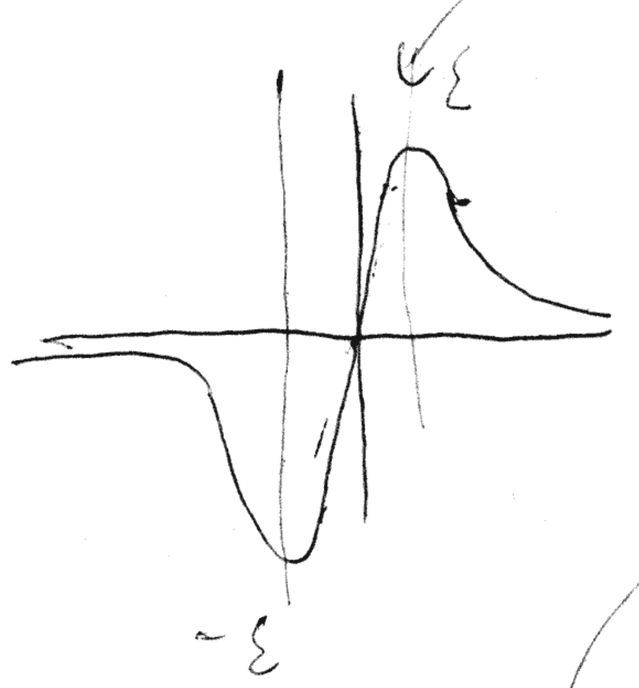
(3.) Kivalasztasi szabaly: $z = \omega_{mn}$ kotes jelen van, ha $\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \neq 0$

Valtozzunk valos frekvenciaran

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

Vizsgaljuk

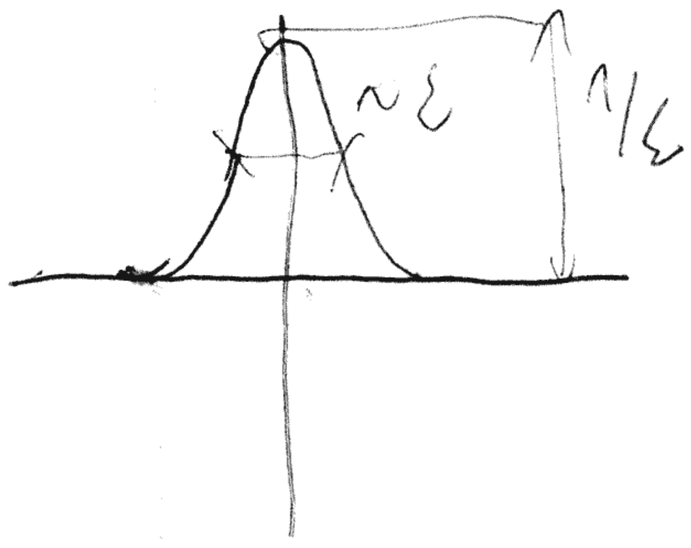
$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x \mp i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \frac{x}{x^2+\varepsilon^2} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$$




$P\frac{1}{x}$

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

$-\infty < x < \infty$ $\quad \varepsilon \to 0$




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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} = \int \frac{dx}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{1+\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vartheta \frac{1}{1+\vartheta^2} =$$

$$= \left[\operatorname{arctg} \vartheta\right]_{-\infty}^{+\infty} = \pi$$

$\rightarrow \pi\,\delta(x)$

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

Ingyen ezzel a Fourier transzformáltra:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\chi_{BA}(\omega+i\varepsilon) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\cdot$$

$$\cdot\left(P\frac{1}{\omega-\omega_{mn}} - i\pi\delta(\omega-\omega_{mn})\right)$$

Szétbontva

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

$\chi'_{BA}$: páros; $\chi''_{BA}$: páratlan

általában nem valós és képzetes rész, az átmeneti mátrixelem miatt.

de pl.: $B=A$ esetén igen:

$$\langle n|A|m\rangle\langle m|A|n\rangle = |\langle m|A|n\rangle|^2$$

B megmaradó mennyiség: $[B,H]=0$

$$B(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,B\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = B$$

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

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

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

lineáris rendben a megmaradó mennyiség nem változik.

nl: H

$$\langle H\rangle_t - \langle H\rangle_e \sim \sigma(t^2)$$

↑ egyensúlyi átlag

— c —

izoterm rotatikus válasznál a megmaradó mennyiség változása nem nulla

$H' = A - At$ t időtől független

$\langle B\rangle = \chi^T_{BA} A$ egyensúlyi átlag $H'$-vel

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

↑

$$A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$$

Ha $[B, H] = 0$

$$= \left( \frac{e^{-\beta H}}{Z} e^{\tau H} A e^{-\tau H} B \right) =$$

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

Eller megmaradó mennyiség..

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

Nincs ellentmondás: izoterm esetben egyensúly

03.02.

$\langle H\rangle_t - \langle H\rangle_0 = \sigma(f^2)$ $\qquad H' = H - A f(t)$

$$\frac{d\langle H\rangle_t}{dt} = \tilde{\mathrm{Tr}}\left(\dot{\rho}(t) H'\right) = -\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathrm{Tr}}\left((H'\rho - \rho H')H\right) = -\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathrm{Tr}}\left(\rho\left(HH' - H'H\right)\right) =$$

$$= -\rho\,[H, A]\,f$$

$$\rho(t) = U(t,t_0)\,\rho_0\,U^+(t,t_0)$$

$$i\hbar U = H'U$$

$$i\hbar\dot{\rho} = [H', \rho]$$

$$\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathrm{Tr}}\left(\rho[H, A]\right) f$$

$$\frac{d\langle H\rangle_t}{dt} = f\tilde{\mathrm{Tr}}\left(\rho(t)\dot{A}(t)\right)$$

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

„gerjesztés" · „válasz"

lineáris válasz periodikus gerjesztésre, monokromatikus esetben.

$$f(t) = \underbrace{f_\omega}_{\in\mathbb{R}} \cos\omega t = f_\omega/2\left(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}\right)$$

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

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

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

Egy periódusra vett átlag:

$$\overline{W} = \left(\frac{f_\omega}{2}\right)^2(-i\omega)\underbrace{\left(\chi(\omega) - \chi(-\omega)\right)}_{\chi(\omega) - \chi^*(\omega) = 2i\,\mathrm{Im}\,\chi(\omega)} = \frac{f^2\omega}{2}\,\omega\,\underbrace{\mathrm{Im}\,\chi(\omega)}_{\mathrm{Im}\,\chi_{AA}}$$

$\left(\frac{f_\omega}{\sqrt{2}}\right)^2 = (\text{effektív érték})^2$

mértül $\qquad$ szorzat $\omega$-ra

előző óra:

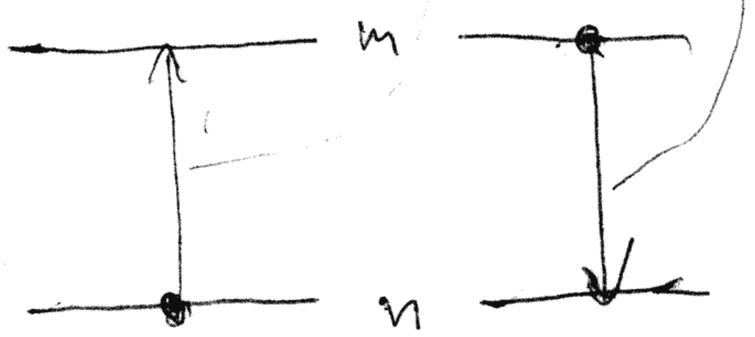
$$\chi_{AA}(\omega) = \chi'_{AA}(\omega) + i\chi''_{AA}(\omega)$$

$\chi'_{AA}$: Re, $\chi''_{AA}$: Im

$$\overline{W} = \frac{f^2\omega}{2}\omega\sum_{n,m}\underbrace{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}_{\left(e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}\right)(E_m - E_n) \geq 0}\underbrace{|\langle n|A|m\rangle|^2}_{(\text{ha } A \text{ valós} = A)}\frac{\pi}{\hbar}\delta(\omega - \omega_{nm})$$

$\omega_{nm} = E_m - E_n$

$$W = \sum_{n,m} \left( \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} - \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \right) \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{f w}{2}\right)^2 |\langle n|A|m\rangle|^2}_{\text{átmenti vektor. Fermi GR}} \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n))(E_m - E_n)$$




## B, A operátorok korrelációs függvénye

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

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

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

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

Ha 2 ismert a többi rajtuk keresztül kiszámítható.

## Energia ábrázolás

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

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

## Fourier trafó

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} = \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{i\omega t} e^{\varepsilon t} + \int_{0}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} = 2\,Re\left( \int_{0}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} \right) =$$

regularizáció

$t = -t'$

$$= 2\,Re \int_{0}^{\infty} dt'\, e^{-i\omega t'} e^{-\varepsilon t'} = 2\,Re \left[ \frac{1}{\varepsilon - i\omega} \right] = 2\,Re \left[ \frac{\varepsilon + i\omega}{\varepsilon^2 + \omega^2} \right] = \frac{2\varepsilon}{\varepsilon^2 + \omega^2} = 2\pi\,\delta(\omega)$$

$\varepsilon \to 0$

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

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

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

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

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

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

univ. fgv.

Kifejezhetjük S-el a másik 2-ből:

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

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

↑ a válasz fgv.-ből a telj. eloszlás tulajdonságait számíttathatjuk ki:

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

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

$$= 2i\,\chi''_{BA}(\omega) \quad \text{(Lapunov-ból vissza)}$$

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

Szimmetrizált-diszipációs tétel:

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

Kapcsolat gyenge zavarral:

$A = B$:

$$C_{AA}(\omega) = \hbar \operatorname{ctgh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \operatorname{Im} \chi_{AA}(\omega)$$

$C_{AA}(\omega)$ ↑ Hermitikus jellemzi

$\operatorname{Im}\chi_{AA}(\omega)$ ↑ $\chi''_{AA}(\omega)$ disszipatív jellemzi

— c —

<u>időtükrözés</u>: $t \to -t$

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

(Koordináta $\varepsilon_A = 1$

impulzus $\varepsilon_A = -1$

dipólmomentum $\varepsilon_A = -1$ )

<u>időtükrözési szimmetria</u>:

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

(idő eltolás invariancia)

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

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

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

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

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

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

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

$$= \varphi_{BA} - \varepsilon_A\varepsilon_B\chi_{BA}(-\omega)$$

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

$\varphi_{BA}(\omega) = \chi_{BA}(\omega) - \varepsilon_A\varepsilon_B\chi^*_{BA}(\omega) = \begin{cases} i2\operatorname{Im}\chi_{BA}(\omega) & \text{ha } \varepsilon_A\varepsilon_B = 1 \\ 2\operatorname{Re}\chi_{BA}(\omega) & \text{ha } \varepsilon_A\varepsilon_B = -1 \end{cases}$

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

$\chi' + i\chi''$ im. von azonos tranformál

$$C_{BA}(\omega) = \mathrm{th}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\hbar\omega}{2}\,\mathrm{Im}\,\chi_{BA}(\omega) \qquad \varepsilon_A\varepsilon_B = 1$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{i}\,\mathrm{th}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\hbar\omega}{2}\,\frac{1}{i}\,\mathrm{Re}\,\chi_{BA}(\omega) \qquad \varepsilon_A\varepsilon_B = -1$$

Klasszikus határeset: $\hbar\omega \ll 2k_BT$

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

$$x \ll 1$$

$$\mathrm{th}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\hbar\omega}{2} \simeq \frac{2}{\beta\hbar\omega} = \frac{2k_BT}{\omega}$$

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

→ kvázi folytonos spektrum alján.

→ ha a fizikai konstansi szabályok csak kis frekvenciákat engednek meg: dominál a klasszikus rész.

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

$$\varphi_{BA}(\omega) = \frac{i\omega\, C_{BA}(\omega)}{2k_BT}$$

$$\varphi_{BA}(t) = -\frac{1}{2k_BT}\,\frac{\partial C_{BA}(t)}{\partial t} = -\frac{1}{2k_BT}\,\langle \dot{B}(t)\,A(0)\rangle$$

Klasszikusan:

$$\chi_{BA}(t) = -\begin{cases} -\frac{1}{2T}\,\frac{\partial C_{BA}(t)}{\partial t} & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

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

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

$$\varphi_{BA}(t) = \frac{1}{2T}\,\langle B(t)\dot{A}(0)\rangle$$

Green-függvényes (és t visszfelé)

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

$t=0$

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

$$\varphi_{BA}(t=0) = \frac{1}{\hbar}\langle [B, A] \rangle = \frac{1}{\pi}\sum_{nm}' \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \frac{\pi}{\hbar}$$

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

így tetsz. deriválttig kiszámolható.

Itt: mérésnél ha OK akkor mértük a szuszceptibilitást, ha nem akkor még kell még tartományban keresztezni

$$\chi_{BA}(z) = \int_0^{\infty} dt\, \frac{e^{izt}}{iz} \varphi_{BA}(t) = \left[\frac{e^{izt}}{iz}\varphi_{BA}(t)\right]_0^{\infty} - \frac{1}{iz}\int_0^{\infty} dt\, e^{izt}\dot{\varphi}_{BA}(t) =$$

$\ln z > 0$

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

így $\frac{1}{iz}$ szerinti aszimptotikus sort kapunk.

$|z| >> 1$

03:09

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

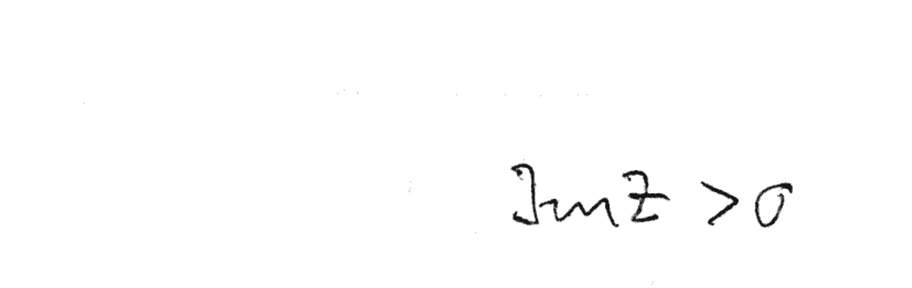
$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{Z}\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\pi\delta(\omega-\omega_{mn})$$

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

$\chi_{BA}(z)$ Fourier trafó; $\chi_{BA}(t)$ - ből $\mathrm{Im}\, z > 0$ értelmes az egész síkon zéróra menő mennyiség

↳ akkor lehúzom az alsó félsíkon: az advanzárált válaszfüggvény

Kvázifolytonos spektrum



⇓ nemzet látjuk $\omega$



$\chi''_{BA}$ "simítása": $\bar{\chi}''_{BA}(\omega)$

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

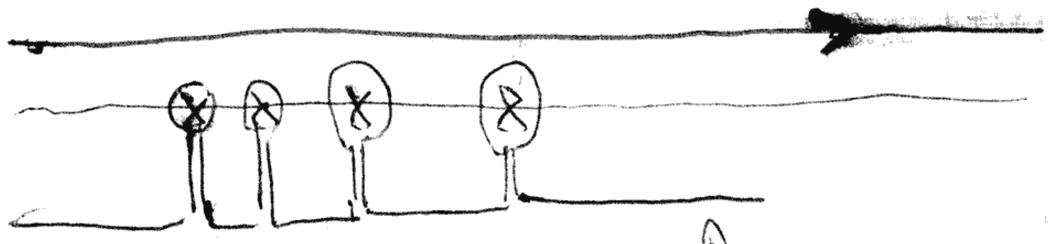
$$\chi_{BA}(z) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{\bar{\chi}''(\omega')}{z-\omega'}$$

$\mathrm{Im}\, z > 0$ $\chi_{BA}(t)$ Fourier trafója

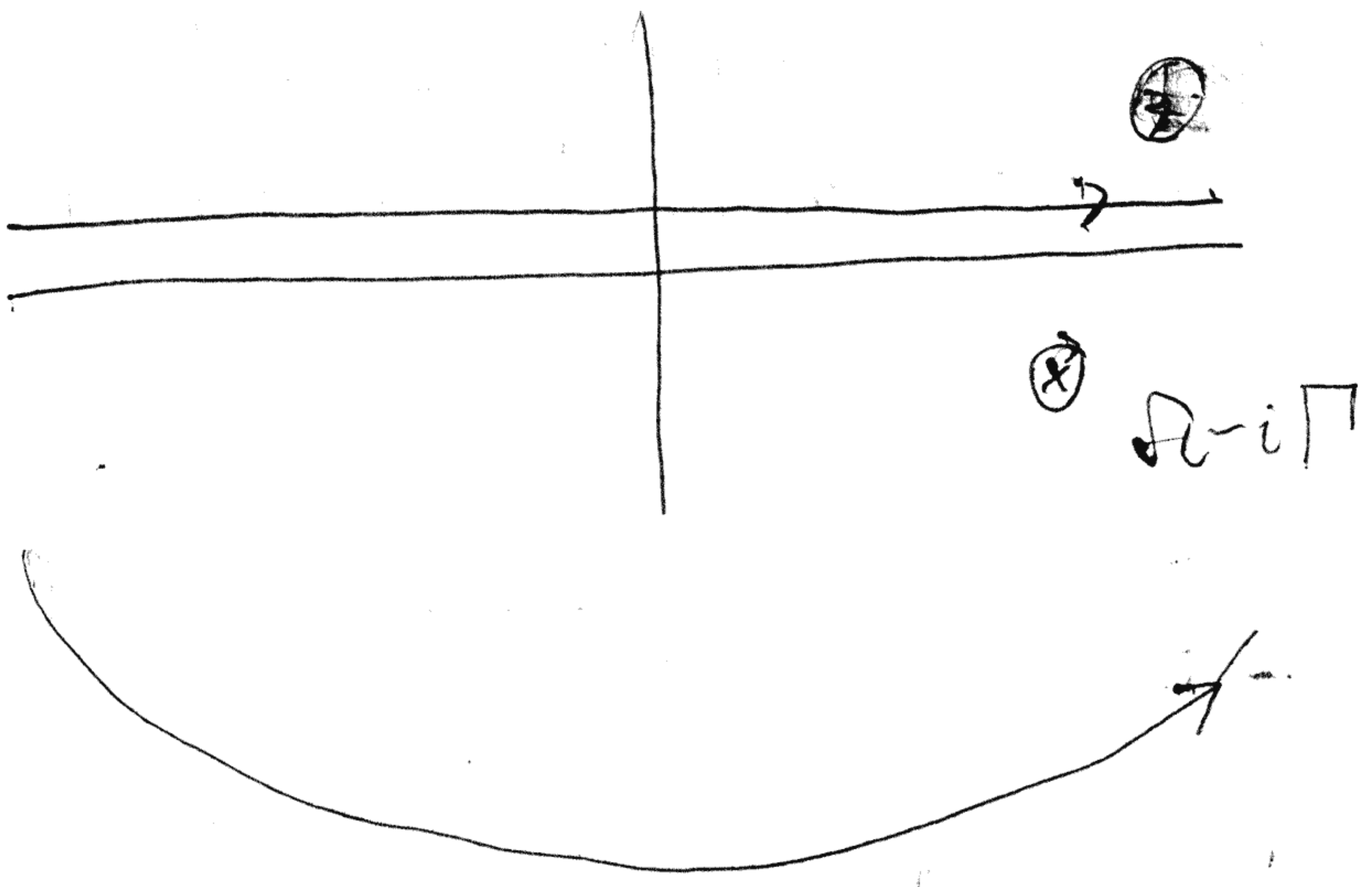
$$\chi_{BA}(t=\omega\pm i\varepsilon) \underset{\varepsilon\to 0}{=} -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\frac{\bar{\chi}''_{BA}(\omega')}{\omega-\omega'} \pm i\pi\bar{\chi}''_{BA}(\omega)$$

(ezért a valós tengelyen vágás)

Ilyen elsimítás esetén nem az alsó félsíkon való fejt értelmét veszíti el



Tovt lélörné: a jámulás
marad a rélusr körüli
integrál




A rélus járulása:

$$\frac{1}{2\pi}\int dz\, e^{izt}\,\frac{R}{z-(\Omega-i\Gamma)} =$$

$$-2\pi i\,\frac{1}{2\pi}\,R\,e^{-i(\Omega-i\Gamma)t} = -iR\,e^{-i\Omega t}\,e^{-\Gamma t}$$

Lecsengő elektromágneses hullám
(t-ben exponenciális elektromágneses)

## elektromos vezetés  e tiltott rés esetén

$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \sum_{i=1}^{N} e\, \underline{r}_i\, \underline{E}(t)$  $\underline{E}(t)$ homogén elektromos térben

↓ potenciálja $-e\, x E$  $(\bar{B} \equiv 0)$

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

$\underline{j} = e \sum_i \underline{v}_i = e \sum_i \frac{\underline{p}_i}{m}$  elektromos áram

$\underline{j} = \dot{\underline{P}}$

$B \to j$  mérjük

$A \to \underline{P}$  számoljuk

$t \to \underline{E}(t)$

**korlátok** → visszahatást nem vesszük figyelembe.

→ $\lambda$(em. hullám hossz) $>> L$(rendszer mérete)

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

$\langle \underline{j} \rangle \parallel \underline{E}$

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

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

$$j = \frac{\dot{P}}{V}$$

$$\langle j \rangle_t = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{t} \varphi_{jp}(t-t')\, E(t')\, dt' = \int_{-\infty}^{t} \sigma(t-t')\, E(t')\, dt'$$

$$\sigma(t) = \frac{1}{V} \chi_{jp}(t)$$

ideális rács: $\left.\begin{matrix} \varepsilon_j = -1 \\ \varepsilon_p = 1 \end{matrix}\right\} \Rightarrow \chi''_{jp}(\omega) = \frac{1}{i} \mathrm{Re}\, \chi_{jp}(\omega) = \frac{V}{i} \mathrm{Re}\, \sigma(\omega)$

Áfírás.

$$\chi_{jp}(t) = \frac{i}{\hbar}\langle [\dot{p}(t), r(0)]\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\chi_{pp}(t)$$

$\dot{p}(t)$

$$\chi_{jp}(\omega) = -i\omega\ \chi_{pp}(\omega)$$

disszipáció:

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

$$\bar{W} = \frac{E_\omega^2}{2}\omega \operatorname{Im}\chi_{pp}(\omega) = \frac{E_\omega^2}{2}\frac{1}{-i}\chi''_{jp}(\omega) = V\frac{E_\omega^2}{2}\operatorname{Re}\sigma(\omega)$$

integrálással:

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

jobb oldal

$$\frac{c}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi''_{jp}(\omega)d\omega = \frac{4}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\operatorname{Re}\sigma(\omega)d\omega$$

bal oldal

$$\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[e\sum_i\frac{p_i}{m}, e\sum_j x_j\right]\right\rangle = \frac{c}{\hbar}\frac{e^2}{m}\sum_{ij}\underbrace{\langle [p_i, x_j]\rangle}_{\delta_{ij}\frac{\hbar}{i}} = \frac{e^2}{m}N$$

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

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

$\sigma$ számítására?

① klasszikus határeset

② relaxációs idő közelítés

① klassziku összefüggés miatt

$$\varphi_{JP}(t) = -\frac{1}{2T}\langle \dot{J}(t)\,P(0)\rangle = \frac{1}{2T}\langle J(t)\,\dot{P}(0)\rangle$$

külső erőtér nélkül ↓ kontinuitási egyenlet

$\dot{P}(0)$

általában a $\cdot$-dot alkalmazzuk egy $\in$

$|t|\to\infty$ esetén 0-hoz tart

$$\lim_{t\to\infty}\langle J(t)\,J(0)\rangle \to 0$$

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

$$\langle J^2\rangle = \left\langle \left(\sum_i e v_i\right)\left(\sum_j e v_j\right)\right\rangle = e^2 \sum_{i,j}\langle v_i v_j\rangle = Ne^2\frac{k_B T}{m}$$

Maxwell féle sebesség eloszlás

$$\delta_{ij}\langle v^2\rangle = \delta_{ij}\frac{k_B T}{m}$$

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

$$\sigma(t) \underset{t>0}{=} \frac{1}{V}\varphi_{JP}(t) = \frac{1}{Vk_B T}\langle \dot{J}(t)J(0)\rangle = \frac{ne^2}{m}e^{-t/\tau}$$ (időben fejl.)

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

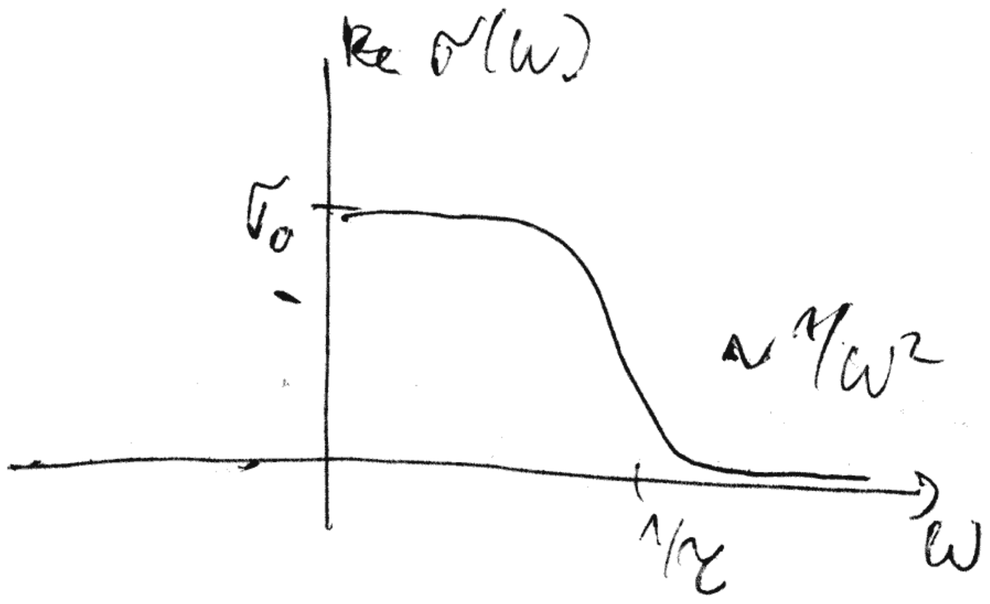
$$\frac{A}{\frac{1}{\tau}-i\omega} = \frac{\tau}{1-i\omega\tau}$$

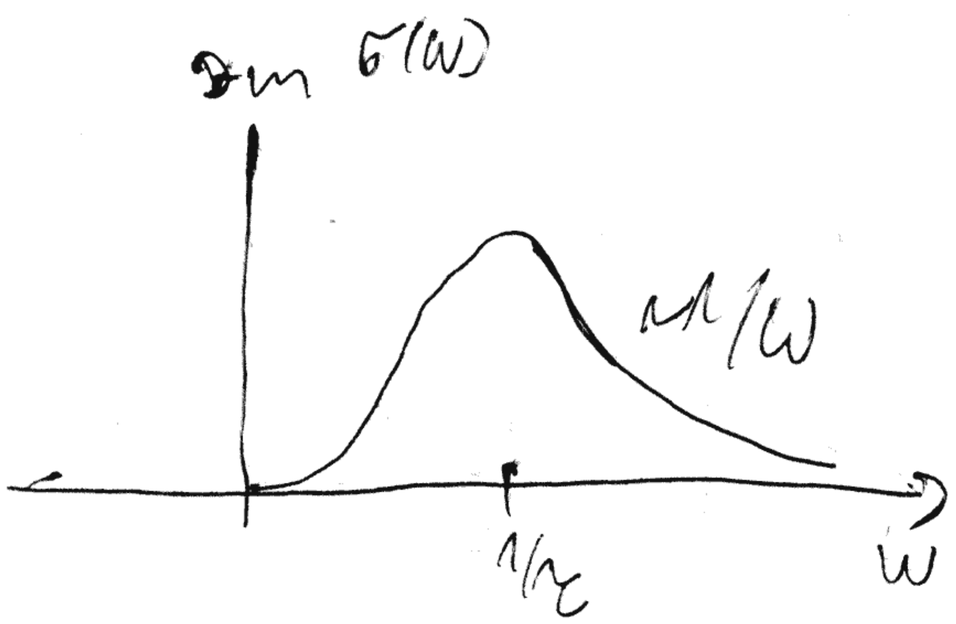
(Drude modell eredménye)

$\underline{\omega = 0}$

$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m}\tau$$

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



$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{Re}\,\sigma(\omega)\,d\omega = \frac{n e^2 \tau}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{1+\omega^2\tau^2} = \frac{n e^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{1+\lambda^2} = \frac{\pi n e^2}{m}$$

$$[\arctg\lambda]_{-\infty}^{+\infty} = \pi$$

Összhang az összeg szabállyal.

→ ~~vegyérték~~ vezetési e⁻-ra $m \to m^*$

→ van polarizációs áram is: bérzi e⁻ „mozgási".

— c —

lokális operátorok $A(r)$

pl: sűrűség $\rho(r) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$

részecskeáram áramsűrűség

$$\underline{j}(r) = \frac{1}{2}\sum \left( \frac{p_i}{m} \delta(r - r_i) + \delta(r - r_i) \frac{p_i}{m} \right)$$

$$\| \sum_i v_i \, \delta(r - r_i)$$

másodkvantálva

$$\rho = \psi^+(r)\,\psi(r)$$

Fourier-transzformált: (homogén rendszerben hasznos lehet)

$$\hat{A}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{iqr} \hat{A}_q$$

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

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

$$\hat{\rho}_q = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{\hbar i}{m} e^{-iqx_i} + e^{-iqx_i} \frac{p_i}{m} \right)$$

nessuno impedisce di scrivere l'equazione di continuità operatoriale

$$\dot{\hat{\rho}}_q = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\rho}_q] = \frac{i}{\hbar} \left[ \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m}, \hat{\rho}_q \right]$$

la dimostrazione del commutatore:

$$\left[ \sum_i \frac{p_i^2}{2m}, \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_j e^{-iqx_j} \right] = \sum_i \left[ \frac{p_i^2}{2m}, e^{-iqx_j} \right] \frac{1}{\sqrt{V}} =$$

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

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

$p = \frac{\hbar}{i} \nabla$

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

$\left[ p, e^{-iqx} \right] = \frac{\hbar}{i} \cdot (-iq) e^{-iqx}$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{V}} (-iq) \sum_i \left( \frac{p_i}{m} e^{-iqx_i} + e^{-iqx_i} \frac{p_i}{m} \right) = -iq \hat{J}_q$$

Teorema finale: $\hat{\rho}(x) = -\nabla \hat{J}$

traslazione simmetria: $\langle A(x) \rangle = \langle A(x+a) \rangle = \langle A(x \neq 0) \rangle$

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

$\langle A_q \rangle = e^{iqa} \langle A_q \rangle \quad \langle A_q \rangle = 0 \quad$ ha $q \neq 0$

Korrelációs függvények

$$\langle B(r), A(r') \rangle = \langle B(\underline{r}+a)\, A(r'+a) \rangle = \langle B(r-r')\, A(0) \rangle$$

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

$$\Downarrow$$

$$\langle B_q A_{q'} \rangle = e^{i(q+q')\underline{a}} \langle B_q A_{q'} \rangle$$

Ha $q+q' \neq 0$ akkor $\langle B_q A_{q'} \rangle = 0$

Ha $q+q'=0$ akkor nem feltétlen 0.

$$\langle B_{q_1} A_{q'} \rangle = \delta_{q_1,-q'} \langle B_q A_{-q} \rangle$$

Két operátornál is csak akkor nem 0 a várható érték, ha a hullámszámuk összege 0.

03.16

Kristály op $A(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{iq\underline{r}} A_q$

transzlációinvariáns: $\langle A(r) \rangle = \langle A(0) \rangle$

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

---

Lineáris csatolás hatása a szuperponálódik

Csatl: $\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \int d^3r\, A(\underline{r})\, f(\underline{r},t)$

$= \mathcal{H} - \sum_q A_q f_{-q}(t)$ eltolásos idő eltolásos

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

$$\varphi_{BA}(r,t) = \frac{1}{\hbar} \langle [B(r,t), A(0,0)] \rangle$$

Transzlációinv. rendszerben $r-t$-től független.

$$\langle B_q \rangle_t - \langle B_q \rangle_0 + \int_0^t dt'\, \varphi_{BA}(q, t-t')\, f_q(t') \leftarrow$$

a lineáris

$$\varphi_{BA}(q,t-t') = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[ B_q(t), A_{-q}(0) \right] \right\rangle$$

$$A(r) = A^+(r)$$

$$\sum_q e^{-iqr} A_q^+ = \sum_q e^{0} e^{iqr} A_q$$

$$A_q^+ = A_{-q}$$

A komponensek nem önmaguk jungáltak, csak az összegük.

## Lineáris válaszelmélet

Zavaró: külső potenciál

$$H' = H + \sum_{j=1}^{N} \phi(r_j, t)$$

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

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

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

Spektrális — spektrális korrelációs függvény:

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

$\chi''_{\rho\rho}(q,\omega) = \frac{\varphi_{\rho\rho}}{\hbar}$ (valós mennyiség, fizikai tartalom!)

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

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

Fluktuáció – disszipáció tétel:

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

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

↑ időelt. nincs

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

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

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

$$= \varphi(q,-\omega)$$

összegzésekből

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(q,\omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega = \varphi(q,t)$$

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

↑ határátmenet

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

$\dot{\varphi}$ - za vsaki koz je integral:

$$\dot{\varphi}(q,t=0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (-i\omega)\, \varphi(q,\omega)$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left( S(q,\omega) - S(q,-\omega) \right) d\omega = =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \omega S(q,\omega)$$

$$= \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} S(q,\omega)\, d\omega$$

$$\dot{\varphi}(q,0) = \frac{i}{\hbar} \langle [\dot{S}_q, \rho_{-q}] \rangle = \frac{i}{\hbar}(-iq) \langle [\Xi_q, \rho_{-q}] \rangle \qquad \dot{S}_q = -i q \Xi_q$$

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

$$- \frac{1}{2V} \sum_j e^{iqr_j} \sum_i \frac{q p_i}{m} e^{-iqr_i} + e^{-iqr_i} \frac{q p_i}{m} =$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_i \left[ \frac{q p_i}{m} e^{-iqr_i} e^{iqr_i} + e^{-iqr_i} \frac{q p_i}{m} e^{iqr_i} \right.$$

$$\left. - q e^{iqr_i} \frac{q p_i}{m} e^{-iqr_i} - e^{iqr_i} e^{-iqr_i} \frac{q p_i}{m} \right] =$$

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

$$- \left( iq\, e^{iqr_i} e^{-iqr_i} \frac{q p_i}{m} + \frac{\hbar}{i} \frac{q(-iq)}{m} e^{iqr_i} e^{-iqr_i} \right) = 2 \frac{\hbar}{m} q^2$$

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

$$\chi(q,0) = \frac{1}{\hbar} \langle q | \rho_q \rho_{-q} \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{N}{V} \frac{\hbar q^2}{2m}$$

$S(q,\omega)$:

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

---

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

mágneses spin-szuszceptibilitás (paramágneses)
(tiltatlan)

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a^+_{i\sigma} a_{i\sigma} \qquad \sigma : \uparrow \downarrow$$

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

mágnesezettség = komponenseinek "sűrűsége"

térbeli Fourier transz

$$m_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \int e^{-i \underline{k} \underline{r}} m(r)\, d^3 r = \left( \psi_q(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{iqr} a_{q\uparrow} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{V} \sum_q \sum_{q'} e^{-iqr} e^{iq'r} e^{-i\Sigma r} \left( a^+_{q\uparrow} a_{q'\uparrow} - a^+_{q\downarrow} a_{q'\downarrow} \right) d^3 r$$

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

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

perturbazione

$$= -\int d^3r \; m(\underline{r}) \; B(\underline{r},t) = -\sum_{\underline{q}}{}' m_{\underline{q}} B_{-\underline{q}}(t)$$

$$\chi(\underline{q},t) = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[ m_B(t) \,,\, m_{\underline{q}}(0) \right] \right\rangle$$

$$\langle m_{\underline{q}} \rangle_{t'} = \int_{-\infty}^{t} \chi(\underline{q}, t-t') \, B_{\underline{q}}(t') \, dt'$$

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

$$\left[ a^{+}_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} - a_{\underline{k}\sigma} a^{+}_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} = -a_{\underline{k}\sigma} \right.$$

($a^{+}_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma}$: $a^{+}_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma} \to 0$; $a_{\underline{k}\sigma} a^{+}_{\underline{k}\sigma}$: $\to 1 - a^{+}_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}\sigma}$)

$\left.\right\lfloor$ $\Downarrow$ $d\mathrm{t}$ $\partial t$

$$a_{\underline{k}\sigma}(t) = a_{\underline{k}\sigma} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{\underline{k}} t}$$

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

$$m_{\underline{q}}(t) = \frac{\tilde{\mu}}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}}{}' \left( a^{+}_{\underline{k}\uparrow} a_{\underline{k}+\underline{q}\uparrow} - a^{+}_{\underline{k}\downarrow} a_{\underline{k}+\underline{q}\downarrow} \right) \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{\underline{k}} t} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{\underline{k}+\underline{q}} t}}_{e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\underline{k}+\underline{q}} - \varepsilon_{\underline{k}}) t}}$$

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

$$\left. \left. \left[ a^{+}_{\underline{k}'\uparrow} a_{\underline{k}'-\underline{q}\uparrow} - a^{+}_{\underline{k}'\downarrow} a_{\underline{k}'-\underline{q}\downarrow} \right] \right] \right\rangle =$$

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

$$a^{+}_{\underline{k}\uparrow} a_{\underline{k}+\underline{q}\uparrow} a^{+}_{\underline{k}'\uparrow} a_{\underline{k}'-\underline{q}\uparrow} - a^{+}_{\underline{k}'\uparrow} a_{\underline{k}'-\underline{q}\uparrow} a^{+}_{\underline{k}\uparrow} a_{\underline{k}+\underline{q}\uparrow} =$$

($a_{\underline{k}+\underline{q}\uparrow} a^{+}_{\underline{k}'\uparrow}$: $\to \delta_{\underline{k}+\underline{q},\underline{k}'} - a^{+}_{\underline{k}'\uparrow} a_{\underline{k}+\underline{q}\uparrow}$)

$$= \delta_{q'\,q+2}\, a^{+}_{q\uparrow} a_{q,\uparrow} - a^{+}_{q\uparrow} a_{q\uparrow}\, \delta_{q,\,q'-2}$$

$$- a^{+}_{q\uparrow}\, a^{+}_{q'\uparrow}\, a_{q+2\uparrow}\, a_{q'-2\uparrow} \quad + \quad a^{+}_{q'\uparrow}\, a^{+}_{q\uparrow}\, a_{q'-2}\, a_{q+2} =$$

a b $a^{+}_{q\uparrow}\, a^{+}_{q'\uparrow}\, a_{q+2}\, a_{q'-2}$

$$= \delta_{q'\,q+2}\, a^{+}_{q\uparrow} a_{q\uparrow} - a^{+}_{q\uparrow} a_{q'\uparrow}\, \delta_{q,\,q'-2}$$

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

$$\left[ a^{+}_{q\uparrow} a_{q\uparrow} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_q - \mu} + 1} = f(\varepsilon_q) \equiv a^{+}_{q\downarrow} a_{q\downarrow} \right]$$

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

A tedy běžnou lehkou Fourier transformací.

# Ideális Fermion gáz spin rezonancia vizsgálata

$$\mathcal{H} = \sum_{q\sigma} \xi_q a_{q\sigma}^+ a_{q\sigma} \qquad f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$\rightarrow \chi(\vec{q},t) =$

Fourier - transzformált:

$$\int_0^\infty e^{-\frac{i}{\hbar}(\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q)t} e^{izt} dt = -\frac{1}{iz - \frac{1}{\hbar}(\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q)} \qquad \mathrm{Im}\, z > 0$$

$$\chi(\vec{q},z) = -\frac{1}{\hbar}\frac{2\tilde{\mu}^2}{V}\sum_{\vec{q}} \frac{f(\xi_q) - f(\xi_{\vec{q}+\vec{q}})}{z - \frac{1}{\hbar}(\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q)}$$

nélkülözhetetlen a gerjesztési reláció!

$k=0 \qquad \chi(\vec{q},z) = 0$

(Kinek megmaradó mennyiség válasza:)

Valós frekvenciák $\qquad z = \omega + i\varepsilon \qquad \varepsilon \to 0$

$$\chi(\vec{q},\omega) = -\frac{1}{\hbar}\frac{2\tilde{\mu}^2}{V}\sum_{\vec{q}} (f(\xi_q) - f(\xi_{\vec{q}+\vec{q}})) \times \mathcal{P}\frac{1}{\omega - \frac{1}{\hbar}(\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q)} - i\pi\delta\left(\omega - \frac{\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q}{\hbar}\right)$$

zérushőmérsékleti határeset: $\omega \to 0$

$\mathrm{Im}\, \chi(\vec{q},\omega=0)$

$\delta\left(\frac{1}{\hbar}(\xi_{\vec{q}+\vec{q}} - \xi_q)\right) \rightarrow \quad \xi_{\vec{k}+\vec{q}} = \xi_{\vec{k}}$

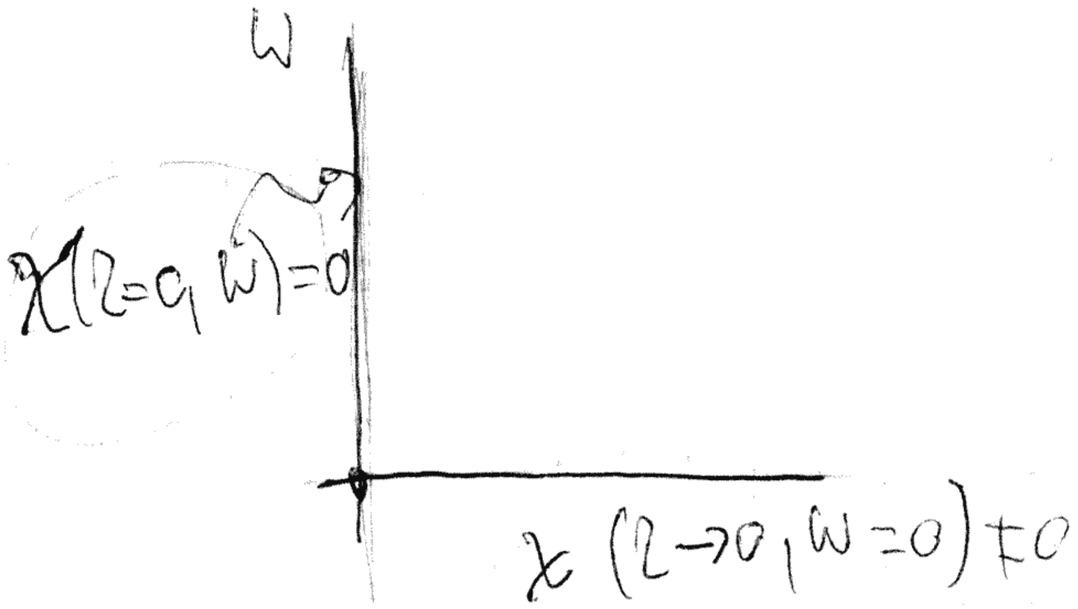
$f(\xi_q) - f(\xi_{\vec{k}+\vec{q}}) = 0 \Rightarrow$ 0 at innen lent.

$$f(\xi_q) - f(\xi_{\vec{k}+\vec{q}}) = \left.\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon_F} (\xi_q - \xi_{\vec{k}+\vec{q}})$$

$$\mathrm{Re}\,\chi(\vec{q},\omega=0) = \frac{2\tilde{\mu}^2}{V}\sum_{\vec{k}} \frac{f(\xi_q) - f(\xi_{\vec{k}+\vec{q}})}{\xi_q - \xi_{\vec{k}+\vec{q}}}$$

$\xi \to 0$

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




Megmutatjuk: az izoterm statikus válaszfüggvénnyel egyezik meg.

homogén mágneses tér: $B \uparrow$ $\qquad \varepsilon_q \mp \tilde{\mu} B$

$$M = V m = \tilde{\mu} \sum_q \left( \langle a^+_{q\uparrow} a_{q\uparrow} \rangle - \langle a^+_{q\downarrow} a_{q\downarrow} \rangle \right) =$$

$$= \tilde{\mu} \sum_q \left( f(\varepsilon_q - \tilde{\mu} B) - f(\varepsilon_q + \tilde{\mu} B) \right) =$$

$$\uparrow \tilde{\mu} \sum_q \left.\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon_q} (-\tilde{\mu} B) \cdot 2$$

B-ben lineáris rendig

$$m = \underbrace{-\frac{2\tilde{\mu}^2}{V} \sum_q \left.\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon_q}}_{\chi_T} B$$

$\chi_T$ = $\chi(\Omega \to 0, W=0$

↑ izoterm ↑ adiabatizálás

——— o ——— lineáris válasz elmélet.

Szab. lehet redukálásra.

kevesi változókat kiemelünk.

A többi változó gyors: zaj

sztochasztikus folyamatok

x fizikai mennyiség $X(t)$

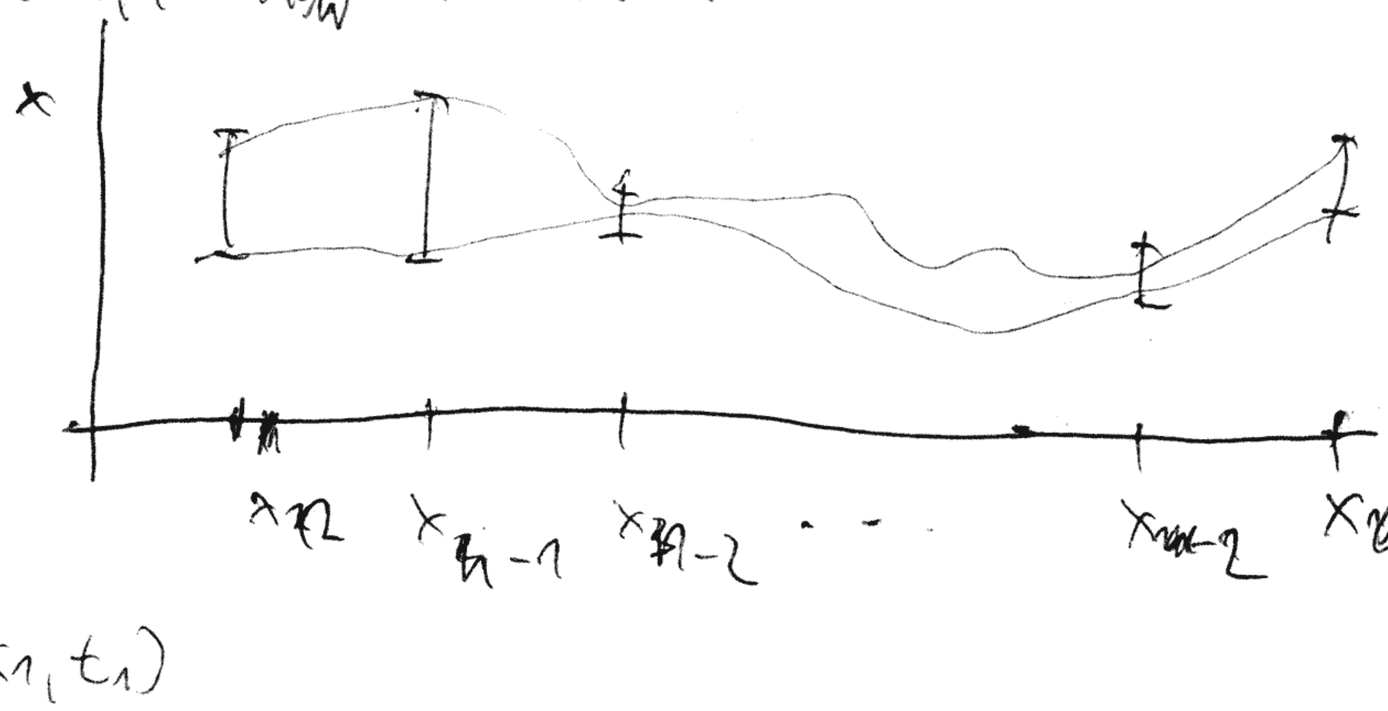
idősor:

$X(t_1), X(t_2), \ldots X(t_n)$

idő"pillanatokban mérjük.

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

$= P_n(x_1 t_1 \ldots x_n t_n) dx_1 \ldots dx_n$




$P_1(x_1, t_1)$

$P_2(x_1 t_1, x_2, t_2)$

⋮

$P_n(x_1 t_1, \ldots x_n t_n)$

t-ben eloszlás (x) = $\int P_1(x, t) x \, dx$

x várhatóértéke

$\langle x(t_1) x(t_2) \rangle = \int P_2(x_1, t_1, x_2, t_2) x_1 x_2 dx_1 dx_2$ korrelációs függvény

Követelmények

(i) Normálás

$$\int p_n(x_1 t_1 \dots x_n t_n)\, dx_1 \dots dx_n = 1$$

Kompatibilitás

$$p_{n-1}(x_1 t_1 \quad x_{i-1} t_{i-1} \quad x_{i+1} t_{i+1} \quad x_n t_n) =$$

$$= \int p_n(x_n t_n \dots x_i t_i \dots x_n t_n)\, dx_i$$

Ha valamilyen minden $i$-nemre az

elemlés lép $+$, akkor az alacsonyabb rendűséget

tudom kódolni redukálni

diszkrét változók

$x(t) \longrightarrow n(t)$ egész értékű változó

$p_n(m_1 t_1 \; m_2 t_2 \quad m_n t_n)$

$$\int dx \longrightarrow \sum_{m}$$

pl: → Ha minden gauss

→ Ha $\forall$ időpontban független az elemlés

Markov folyamatok

Markov - tulajdonság

Feltételes valószínűség $P(x_n t_n | x_2 t_2 \quad x_n t_n) =$

$$= \frac{p_n(x_1 t_1 \; x_2 t_2 \dots x_n t_n)}{p_{n-1}(x_2 t_2 \quad x_n t_n)}$$

Markov tul: a feltételek közül csak a legmagasabb idő argumentumú számít

$$P(x_1 t_1 | x_2 t_2 \underbrace{x_3 t_3 \ldots x_n t_n}) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)$$

eddtől nem függ

átmeneti valószínűség

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

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

„folyamat" $\rightarrow P(x t \,|\, x' t')$

„lezárt feltétel" $\rightarrow p_1(x, t)$

meghatározza az elemeket

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

$$\downarrow \int dx_2$$

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

Nem lehet az átmeneti valószínűség kérdésében!

## Chapman – Kolmogorov egyenlet

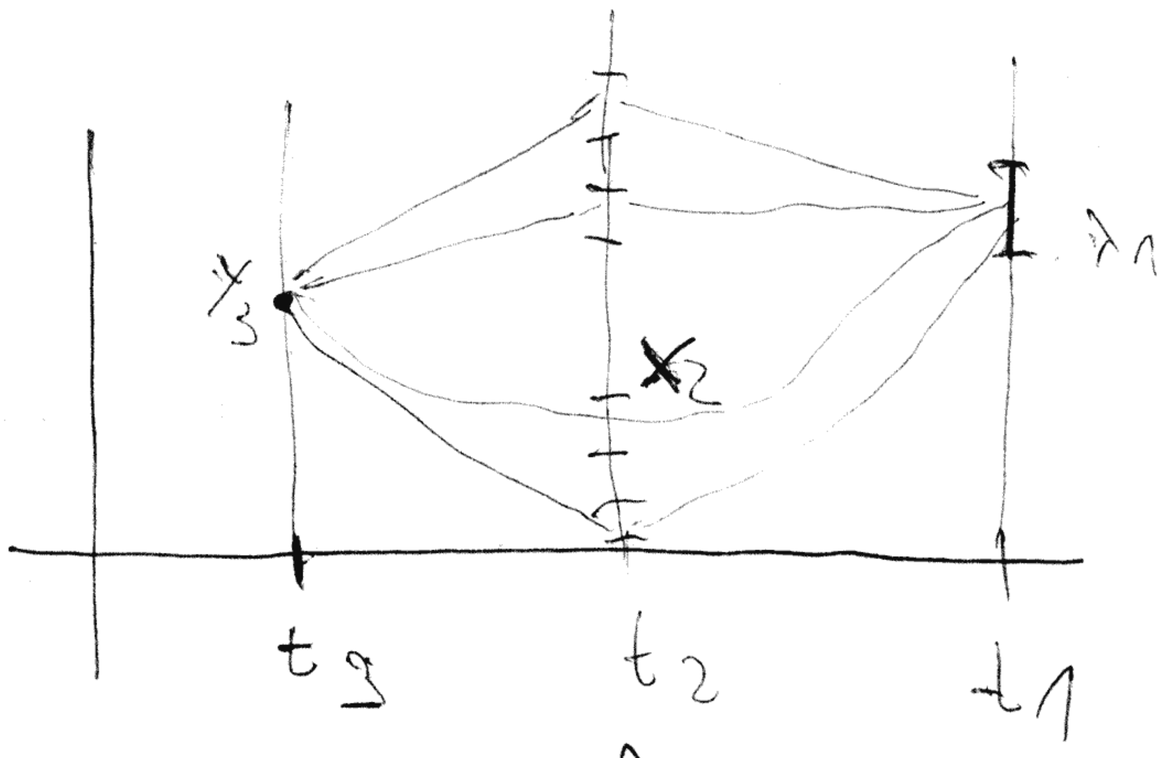
$$p_3(x_1 t_1, x_2 t_2, x_3 t_3) = P(x_1 t_1 | x_2 t_2)\, P(x_2 t_2 | x_3 t_3)\, p_1(x_3 t_3)$$

$$\int dx_2$$

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

$$\rightarrow P(x_1 t_1 | x_3 t_3)\, p_1(x_3 t_3)$$

$$P(x_1 t_1 | x_3 t_3) = \int P(x_1 t_1 | x_2 t_2) P(x_2 t_2 | x_3 t_3) dx_2$$




Markovnál az $x_2$ köli hely ($x_i$) megadja az átm. valv. nem Markovnál nem.

homogén Markov folyamat:

$$P(x_1 t_1 | x_2 t_2) = P(x_1 t_1 + \tau | x_2 t_2 + \tau)$$

$$\tau = -t_2 \qquad = P(x_1 t_1 - t_2 | x_2 0)$$

Nem minden áll. időben sűrűségi feltétel miatt

stacionárius állapot (folyamat)

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

ergodikus Markov folyamat:

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

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

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

$$= p^*(x) \underbrace{\int p_1(x'|0)\,dx'}_{1} = p^*(x)$$

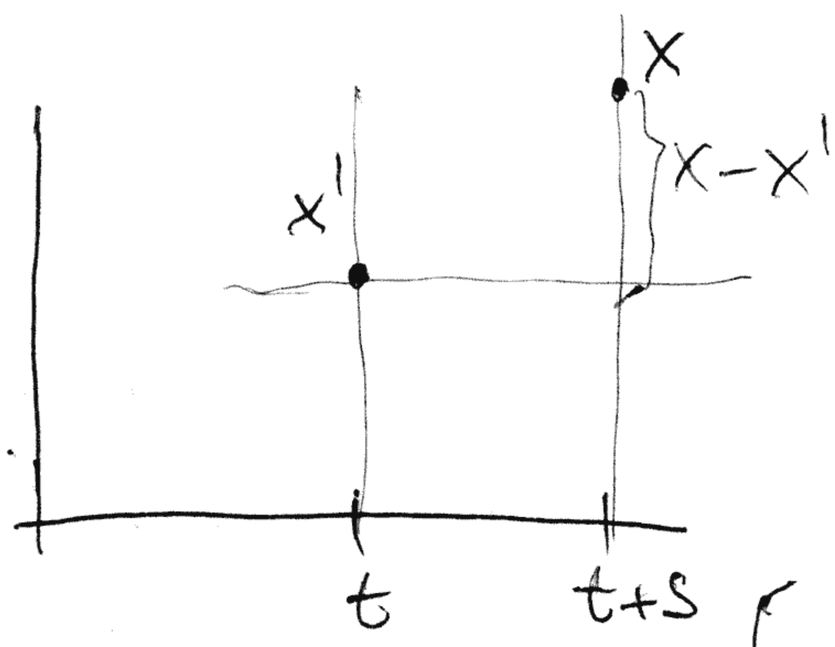
2 féle lefutásmód → nagyó

↓

diffúziós (lokálos idő fejl.)

<u>diffúziós folyamatok</u>

def: növekmények momentumai (feltételes)




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

s-el arányos i>0-hoz nagyobb (kis orde)

s hosszon a növekmény várható értéke

($n=0$ -ra normálás miatt 1 !)

feltételes

Ez a Gauss-eloszlás jellemzője

A növekmény s-el arányos, a trajektória folytonos, de nem deriválható sehol sem.

(Bármit írtam elé most az nem mond semmit a múltról, ha a trajektória diffható lenne, izmokról is tudnék mesélni.)

$\overline{(x-x')} = v(x')\Delta$

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

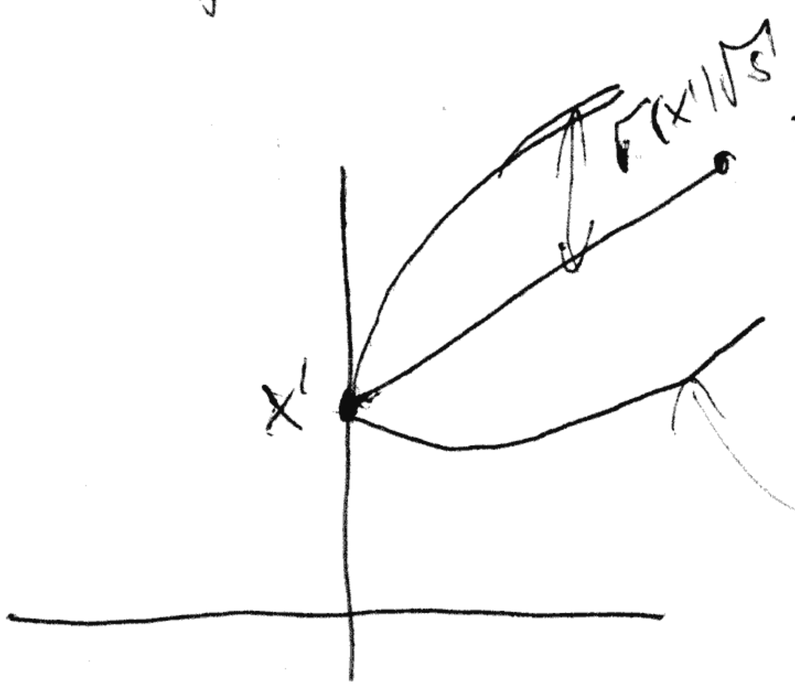
$\downarrow$

$\sigma(\Delta)$

$$p(x\Delta|x') \underset{\uparrow}{\approx} C\, e^{-\frac{(x-x'-v(x')\Delta)^2}{2\sigma^2(x')\Delta}}$$

int.
$\Delta \to 0$

Miért hívják diffúziós folyamatnak?




$\overline{x} = x' + v(x')\Delta$

↑ drift sebesség

$\sigma(x')\sqrt{\Delta}$ : szórás, kiszélesedés, az eltelt idő négyzetével, mint a diffúziónál.

Nem deriválható

$x - x' \sim \sqrt{\Delta}$

$\frac{\sqrt{\Delta}}{\Delta} \sim \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \to \infty$

Chapman Kolmogorov (Markov-e?) $\longrightarrow$ diffúziós folyamat $\longrightarrow$ Fokker-Planck egyenlet

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(v(x)P) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\sigma^2(x)P)$$

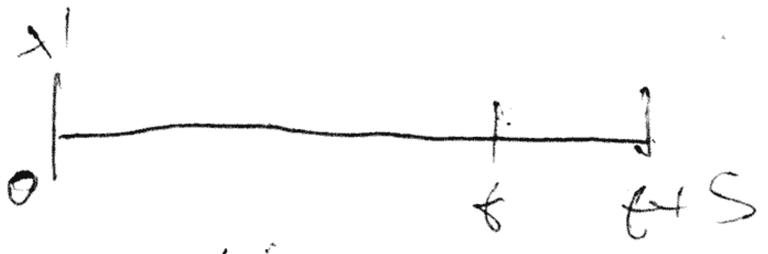
$$P(x,t=0|x') = \delta(x-x')$$

sztochasztikus → Markov → diffúziós
                       → ugrás

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

03.30

feltételes várható érték:




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

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

Chapman Kolmogorov → $P(x,t+s|x')$

$$\int dx\, f(x) \int d\tilde{x}\, P(x,\tau|\tilde{x})\,P(\tilde{x},t|x') = \int d\tilde{x}\Big[f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})v(\tilde{x})s + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})\sigma^2(\tilde{x})\tau + o(s)\Big] \cdot P(\tilde{x}\in|x')=$$

↑ Taylor elemek

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

parc. int. + határátmenet: $x\to\pm\infty$

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

tetszőleges $f(x)$:

$$\frac{\partial P(x,t|x')}{\partial t'} = -\frac{\partial}{\partial x}\Big(v(x)P(x,t,x')\Big) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\frac{\sigma^2(x)}{2}P(x,t,x')\Big)$$

Fokker – Planck egyenlet.

határfeltétel: $\tau \to 0$

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

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

$P_1(x,t)$ részecske a folyadékban

A terelltűadban $\sigma^2(x)$ nem függ x-től.

Wiener-folyamat

$$V(x) \equiv 0$$

$$\sigma^2 = 2D$$

A Fokker-Planck tartozó F-P:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}$$

A diffúziós egyenlet!

—o—

generátor függvények

$p(x)$ valós számsor

generátor fgv: $\phi(z) := \overline{e^{zx}} = \int dx p(x) e^{zx}$

momentum-generátor függvény

z-szerinti sora generálja a momentumokat!

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

$$\frac{\partial^l \phi(z)}{\partial z^l} = \overline{x^l}$$

$\ln \phi(z)$ kumuláns-generátor fgv.

$$\ln \phi(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} z^l \; l \; \ell$$

↑ kumulánsok

1. deriv

$$\frac{\partial \ln \phi}{\partial z} \Big|_{z=0} = \kappa_1$$

$$\frac{\partial \ln \phi}{\partial z} = \frac{1}{\phi} \phi'$$

$z=0 \qquad \kappa_1 = \bar{x}$

2. deriv $\dfrac{\partial^2 \ln \phi}{\partial z^2} = \dfrac{\phi''}{\phi} - \dfrac{1}{\phi^2} \phi' \phi'$

$z=0$

$\kappa_2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$

3. deriv

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

$z=0$

$$\kappa_3 = \overline{x^3} + 2\bar{x}^3 - 3\overline{x^2}\,\bar{x} = \overline{x^3} - 3\bar{x}(\overline{x^2} - \bar{x}^2) - \bar{x}^3$$

— c —

$\overline{x \times x} = \bar{x}^3 - 3(\bar{x})$ (2. kum) $-$ (1. kum)$^3$

1. kum

($\bar{x}^2$)

↑ kétszeres az összes elemszámból vendég kum -ba nem kerül

↑ magasabb kumm -ok

Gauss eloszlás: $p_\kappa(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{x^2}{2\Delta}}$

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

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

a

Tehát: $\phi(z) = e^{\frac{1}{2}\Delta z^2}$

$\Sigma_1 = 0$

$\Sigma_2 = \Delta$

$\Sigma_\ell = 0 \quad (\ell \geq 3)$

ha nem az origóra centrált:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta}}$$

$$b(z) = e^{z x_0 + \frac{\Delta}{2} z^2}$$

momentumok:

$$\phi(z) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} \frac{\Delta^\ell z^{2\ell}}{2^\ell} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{(2\ell)!} \frac{\Delta^\ell z^{2\ell}}{2^\ell \ell!} (2\ell)!$$

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

$$\overline{x^{2\ell}} = \Delta^\ell \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2\ell-1)$$

A Wiener-folyamat egyenletét írjuk a generátor függvény egyenletére.

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

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

$$\int e^{zx} \ldots dx$$

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

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

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

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

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

$$\phi(z,t) = \phi(z,0) e^{D z^2 t} = e^{z x_1 + D z^2 t}$$

↑
Gauss eloszlás generátor függvénye.

$$\overline{x} = \bar{x}^1$$

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

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

Wiener - folyamat sűrűségfüggvénye: $W(t)$ $\quad W(t=0) = 0$

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

$$\overline{W} = 0 \qquad \overline{W^{2l+1}} = 0$$

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

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

Korrelációs függvény: $\overline{W(t)\, W(t')}$ $\quad t, t' > 0$

$$\overline{W(t)\, W(t')} \underset{t > t'}{=} \int dW\, dW'\, \underbrace{p_2(W t, W' t')}\, W W' =$$

$$P(W, t-t'|W')\, P(W', t'|0)$$

↑ Chapman

$$= \int dW' \overbrace{\left( \int dW\, W\, P(W, t-t'|W') \right)}^{W'} P(W' t'|0) \, W' \equiv \int dW' \, W'^2 P(W', t'|0) = \sigma^2 t'$$

Összefoglalva:

$$\overleftarrow{W(t)\,W(t')} = \sigma^2 \min(t,t')$$

Határát:

$$\overleftarrow{(W(t)-W(t'))\,W(t')} = \overleftarrow{W(t)-W(t')}\;\overleftarrow{W(t')}$$

$W(t)$ és $W(t')$: függetlenek

$W(t)-W(t')$: 0

$W(t')$: e

$$\overleftarrow{W(t)\,W(t')} - \overleftarrow{W(t')^2} = 0$$

$\overleftarrow{W(t')^2}$: $\sigma^2 t'$

Gauss fehér zaj általánosított sztochasztikus

momentumok / kumulánsok: disztribúció teljesen

csak 1. és 2. kumuláns $\neq 0$

$$\overleftarrow{\xi(t)} = 0$$

↑ a fehér zaj $\xi(t)$

$$\overleftarrow{\xi(t)\,\xi(t')} = \sigma^2\,\delta(t-t')$$

// Nullának tekinthető a korreláció ideje a tér

lefolyamatéhoz képest //

Állítás: a fehér zaj a Wiener lefolyamat deriváltja.

$$Y(t) = \int_0^t \xi(s)\,ds$$

$Y(t)$: Gauss eloszlás lesz (mert $\xi(s)$ Gauss)

$$Y(t=0) = 0$$

$$\overleftarrow{Y(t)} = 0$$

$$\overleftarrow{Y(t)\,Y(t')} = \int_0^t ds \int_0^{t'} ds'\; \overleftarrow{\xi(s)\,\xi(s')} \overset{t>t'}{=} \int_0^t ds \int_0^{t'} ds'\; \sigma^2(s-s') =$$

$$= \sigma^2 \int_0^{t'} ds' = \sigma^2 t'$$

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

$\Psi(t)$ Gauss $\Rightarrow$ valódi $\mathbb{R}$ + része Wiener

$\Downarrow$

$\Psi(t)$ Wiener folyamat.

**Langevin – egyenletek**

$$\boxed{\dot{X}(t) = v(X(t)) + \xi(t)}$$

A mikrorészecskék mozgását leíró

mozgásegyenlet: a lejtést adó (determinisztikus) rész; $\xi(t)$: zaj

feltevés: $\xi(t)$ Gauss típusú fehér zaj. $\overline{\xi(t)} = 0$

$$\overline{\xi(t)\,\xi(t')} = \sigma' \delta(t - t')$$

– $v$ nélküli időskálán vizsgálva a részecske mozgását fehér zaj hatására –

– $v$ nélküli $dt$ alatt CHT $\rightarrow$ Gauss –

– e –

**értelmezés:** rövid időre integrálva a mozgásegyenletet a mozgásegyenletnek megfelelő Wiener folyamatra.

$$dX(t) = X(t+dt) - X(t) = v(X(t))\,dt + d\,W(t)$$

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

$$\boxed{dX(t) = v(X(t))\,dt + d\,W(t)} \quad + \sigma(dt)$$

$\sim \sqrt{dt}$

ún. Sztochasztikus diff. egyenletek.

$X(t)$ Markov - folyamat:

$X(t+dt)$ - t meghatározza

$X(t)$
$dW(t)$ Ismeretében $t' < t$ esemény

$X(t)$ diffúziós folyamat

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

$$\overline{dx(t)^2} = \overline{(v(x(t))dt + dW(t))^2} =$$

$$\leq \overline{(v(x(t))dt)^2} + \overline{dt\, v(x(t))dt\, dW(t)} + \overline{dW(t)^2} =$$

($\overline{dW(t)} = 0$; $\overline{dW(t)^2} = \sigma^2 dt$)

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

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

$$\vdots$$

minden megoldható rendűre

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

F-P egyenlete:

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

Nem mindegy $\sigma^2(x)$ esetén melyik sztoche integrálban az $\alpha^2$ az intervallum közepén vesszük-e a végén.

Ito - bele értelmezés (elején)

Stratonovich - bele értelmezés (közepe)

$$\dot{x}(t) = v(x(t)) + \alpha(x)\xi(t)$$

↳ $\alpha^2(x)\sigma^2\delta(\,)$ a δ-nél lévő kép.

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

$$+ \alpha\,\frac{x(t)+x(t+dt)}{2}\,dW(t) \quad \text{Stratonovich.}$$

Ezek közötti $\exists$ P egyenletre vezetnek.

04.06.

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

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

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

---

több változós: $\underline{x} = (x_1 \dots x_n)$

d. egyenlet $\dot{x}_i = v_i(\underline{x}) + \xi_i(t)$

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

$D_{ij} = D_{ji}$

F. Planck egyenlet: $P(\underline{x}, t \mid \underline{x}')$-re

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i(x)P) + \sum_{ij} D_{ij}\frac{\partial^2 D}{\partial x_i \partial x_j} =$$

mozitler delimit

$$= -\sum_i \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \; v_i P + \sum_j D_{ij} \frac{\partial P}{\partial x_j} \right]$$

$\underbrace{\qquad\qquad}$ "i" valószínűségi áramsűrűség

---

<u>stacionárius megoldás</u>

$P_1(x,t) = P_S(x)$ $\quad$ $t$ -től független

$P_S(x) > 0 \Rightarrow$ $\quad P_S(x) = e^{-\phi(x)}$ alakba írható

<u>1 változós esetben</u>

$$0 = -\frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left( v(x) P_S(x) - D \frac{\partial P_S}{\partial x} \right)}_{j}$$

$j$ = állandó

$v(x) P_S(x) - D \frac{\partial P_S}{\partial x} =$ állandó

$\pm\infty$ -ben $P_S(x) \to 0$ $\quad \frac{\partial P_S(x)}{\partial x} \to 0$ $\quad \Rightarrow$ állandó $= 0$

$$v(x) P_S(x) = D \frac{\partial P_S(x)}{\partial x}$$

$$\ln \frac{P_S}{C} = \frac{1}{D} \int v(x) dx$$

$$P_S(x) = C e^{\frac{1}{D} \int v(x) dx}$$

$P_S = e^{-\phi}$

$$\rightarrow D \frac{\partial \phi}{\partial x} e^{-\phi} = v e^{-\phi}$$

$$\boxed{v = -D \frac{\partial \phi}{\partial x}}$$

tétlen vektortér

$$-\sum_i \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x_i} = 0 \qquad \rho_S = e^{-\phi} \nu e l \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ v_i + \sum_j D_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] e^{\phi} = 0$$

(A) legyen $\mathcal{J}_i = 0$ (megfelelő feltétel)

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

(B) $\mathcal{J}_i \neq 0$

egy példa:

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

$Q_{ij}$: antiszimmetrikus

$D_{ij}$: nem definit szimm.

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

$Q_{ij}$: szimmetrikus × antiszimm. mátrat szorzat nyoma 0

$Q_{ij}$: szimmetrikus

A determinisztikus egyenlet

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

$x_i(t)$ megoldás $\phi(x(t))$

$$\frac{d\phi(x(t))}{dt} = \sum_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \dot{x}_i = \sum_i \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_i} v_i \right) = \sum_{ij} Q_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - \sum_{ij} D_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \leq 0$$

$Q_{ij}$: antiszimm. $D_{ij}$: nem def szimm.

$\phi$ változása nemnegatív

konzervatív

kvázipotenciál

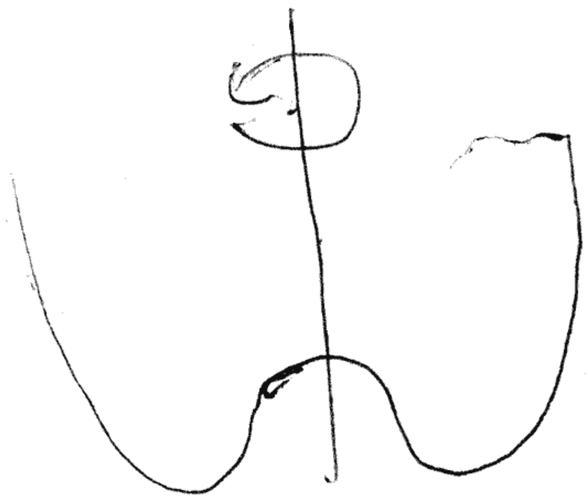
megszigorított feltétel

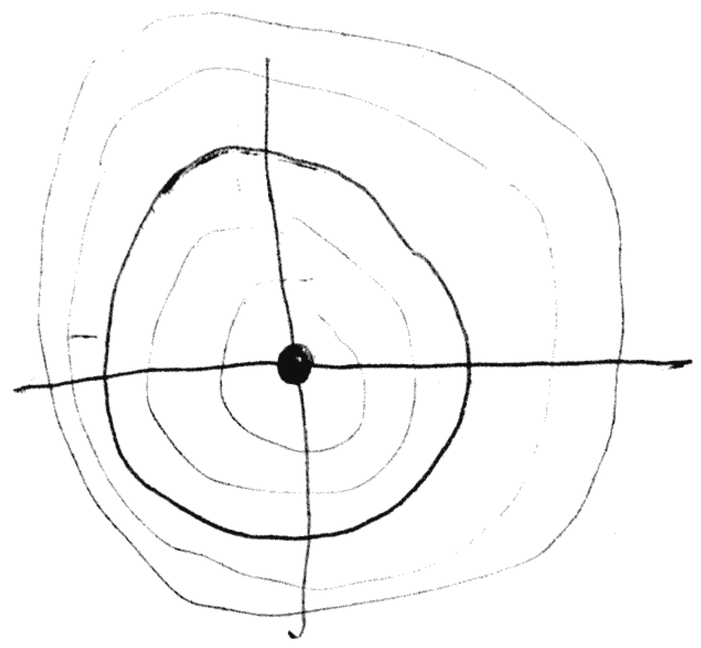
nem det szimm

$\phi$ egy minimum pontjára vezetel a determinisztikus mozgás

A minimum nem 1 pontból áll

$$\Sigma = (x_1, x_2)$$





$\phi$: un zajmentes kiegyenlítés

<u>lineáris relaxáció</u> $v(x) = -\gamma x$

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

FP egyenlet $\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\gamma x P) + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$ $P(x_1, 0 | x', 1) = \delta(x - x')$

stacionárius eloszlás

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

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

generátor fgv: $G(z,t) = \overline{e^{zx}}$ (elég az időfüggő részt vizsgálni)

$$G(z,0) = e^{zx}$$

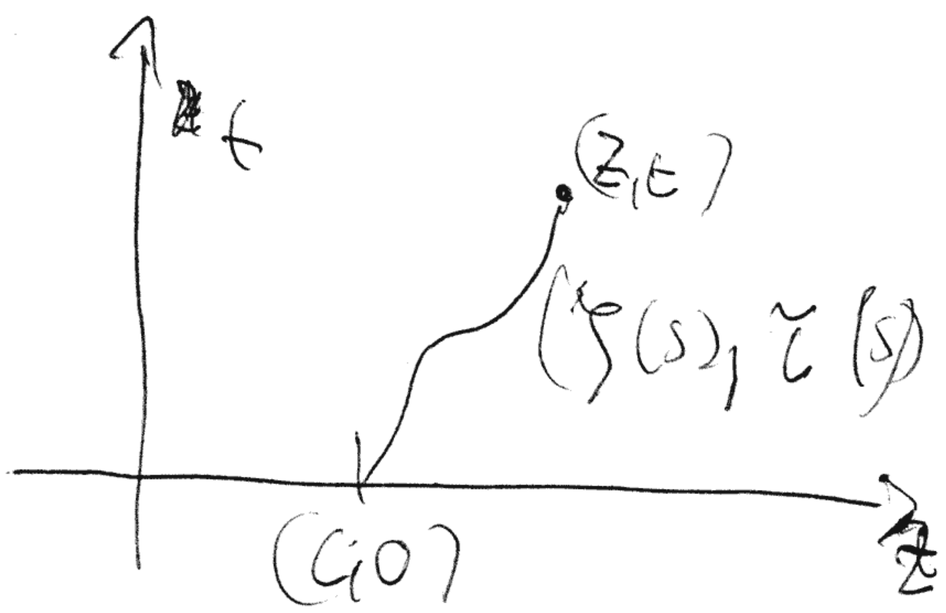
$$\frac{\partial P}{\partial t} e^{zx}\,dx = \frac{\partial}{\partial t} G(z,t)$$

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

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

A generatrix legyen $\eta$. rendű diff egyenlet.

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} &= -\eta z \frac{\partial G}{\partial z} + D z^2 G \\ G(z,0) &= e^{zx'} \end{aligned}\right\}$$




$\xi(s=0) = x$

$\tau(s=0) = 0$

$\xi(s=1) = ?$

$\tau(s=1) = t$

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

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

zeneretrix.

$$\frac{d\xi}{ds} = +\eta\xi \qquad \frac{d\tau}{ds} = 1$$

$$\frac{\partial G}{\partial z} + \frac{\partial G}{\partial t} = D\xi^2 \in$$

Linearis $\xi, \tau$-re:

$\tau = s$

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

$$\xi(s) = c_0 e^{\eta s}$$

$(z,t)$ mint $\tau(s) = t \qquad s = t$

$\xi(s) = z \qquad z = ce^{\gamma t}$

(*) mint

$$\frac{dG}{G} = D\xi^2\, ds$$

$$\ln \frac{G(s)}{G(0)} = D \int_0^s \xi^2(s')\, ds' = D\int_0^s c^2 e^{2\gamma s'} ds' = Dc^2 \frac{e^{2\gamma s} - 1}{2\gamma}$$

$$G(s) = \underbrace{G(s=0)}_{\phi(\xi,0) = \phi^{exakt}} e^{\frac{D}{2\gamma} c^2 (e^{2\gamma s} - 1)} = G(\xi(s), z(s))$$

Ebből egyből a teljes megoldás:

$$s = t$$

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

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

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

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

Gauss eloszlás

$$\alpha^2(t) = \overline{x^2} - \overline{x}^2 \qquad \alpha^2(t) = \frac{D}{\gamma}(1 - e^{2\gamma t})$$

$\bar{x}(t)$

$x'$ $\sim e^{\gamma t}$

$D/\gamma$

$e^{2\gamma t}$

Ornstein-Uhlenbeck - folyamat

$$\text{propagátor: } P(x,t|x') \longrightarrow P_S(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi P_0}} e^{-\frac{1}{2P}x^2}$$

Brown-mozgás $(x,p)$

$$\dot{x} = \frac{p}{m}$$

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

$\xi(t)$ legyen gauss típusú lehet zaj

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

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

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

$$\left.\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} - \gamma m \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \xi \end{aligned}\right\}$$

Egyensúlyi eloszlás stacionárius állapotban:

$$e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} = e^{-\phi} C$$

$$\phi = \frac{\mathcal{H}}{k_B T}$$

$$\dot{x} = \zeta_{BT} \frac{\partial \phi}{\partial p}$$

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

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \zeta_{BT} \\ -\zeta_{BT} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial\phi/\partial x \\ \partial\phi/\partial p \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma m \zeta_{BT} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial\phi/\partial x \\ \partial\phi/\partial p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \xi \end{pmatrix}$$

konzervatív disszipatív

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

Wiener folyamat megvalósult.

stacionárius állapotban:

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

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

$p(t)\,dW_t = 0$

legyen $-2\overline{\frac{\partial U}{\partial x}\,dt\,dW_t} - 2\gamma\overline{p(t)\,dW_t\,dt}$

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

2D $\quad \rightarrow \overline{dW_t^2} = 2\gamma\,\overline{p(t)^2}$

$\frac{k_B T}{m}$

Ezeknek a lépéseknek a Fokker-Planck egyenlethez:

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\frac{\partial U}{\partial x}\frac{1}{m} - \gamma v + \frac{\xi}{m}$$

$$\overline{\xi(t)\xi(t')} = 2\gamma\frac{m k_B T}{m^2}$$

$$P(x, v, t \mid \ldots)$$

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

túlcsillapított mozgás: $\ddot{x} \approx 0$

Az impulzus értéke rögtön beáll a potenciál által megszabott értékre a csillapítás olyan erős

$$-\frac{\partial U}{\partial x} - \gamma p + \underbrace{\quad}_{\text{nő}} = 0$$

$$\dot{x} = -\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\xi}{\gamma m}$$

Szabad - Plane eqyenlet

$P(x,t|\dots)$

$\alpha$ egyenlet.

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

um. Kramers egyenlet.

$$\overline{\xi \cdot \xi} = 2\gamma m k_B T$$

04.13.

$$\dot{x} = \frac{p}{m}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial u}{\partial x} - \gamma p + \xi$$

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

$$P_S(x,v) \sim e^{-\frac{H}{kT}}$$

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

— c —

Szabad Brown - mozgás $u(r) \equiv 0$

$$m\ddot{r} = -\underbrace{\gamma m}_{\Gamma} v + \xi$$

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

Ohrnstein - Uhlenbeck egyenlet

$$\dot{v} = -\gamma' N + \xi/N$$

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

| Brown | FU |
|---|---|
| $\gamma$ | $\gamma$ |
| $\frac{\gamma k_B T}{m}$ | $D$ |

## más megoldás módszer

Megoldjuk a Langevin egyenletet, $\xi$ inhomogén taggal

$$v(t) = \underbrace{v_0 e^{-\gamma(t-t_0)}}_{\text{A kezdeti feltételt tartalmazó tag exponenciálisan lecseng.}} + \underbrace{\frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} dt' e^{-\gamma(t-t')}\xi(t')}_{1/\gamma \text{ idejű emlékezet}}$$

$t = t_0$: $\quad v(t_0) = v_0$

$1/\gamma$ időnként exponenciálisan

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

$1/\gamma$ időn túl: stac. állapot.

termalizáció stac. állapot elérése: $t \to -\infty$

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

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

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

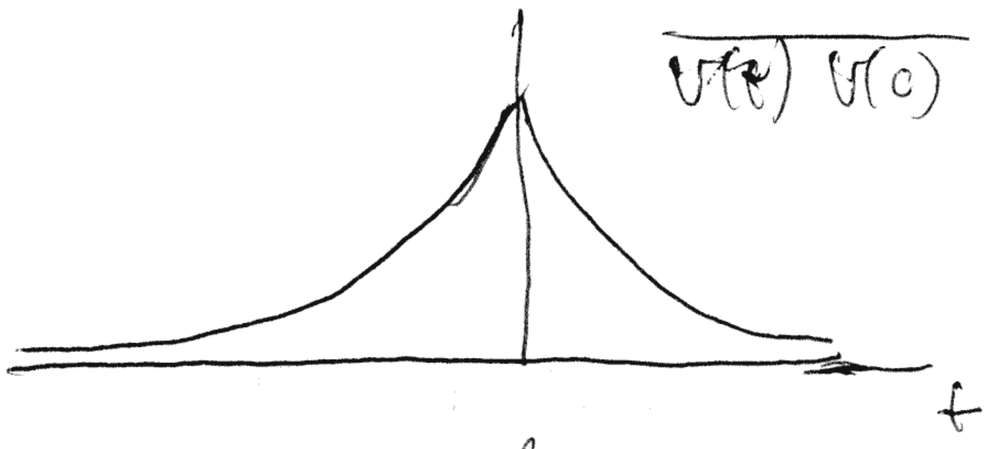
$$\overline{\xi(s)\xi(s')} = 2\gamma m k_B T\, \delta(s-s')$$

$t > t'$

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

$$\overline{v(t)\,v(t')} = \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma(t-t')}$$

$t = t'$ $\quad \overline{v(t)^2} = \frac{k_B T}{m}$

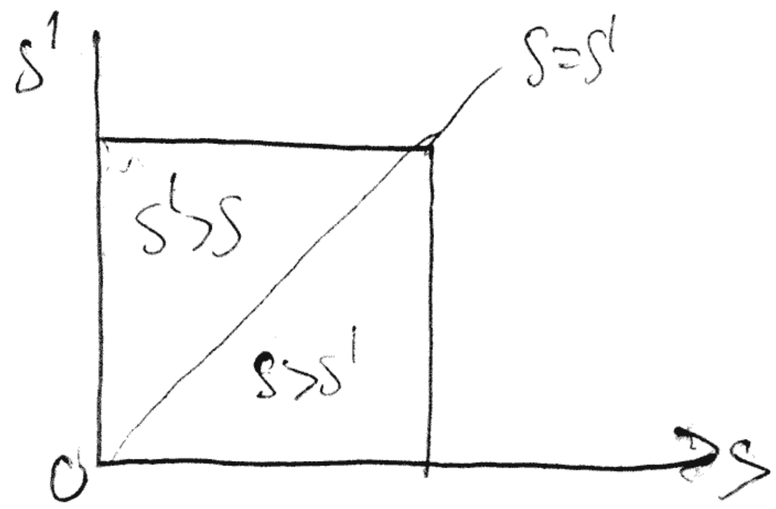



$$x(t) - x(0) = \int_0^t ds\, v(s)$$

~~$\overline{x(t)}$~~ =

$\overline{x(t) - x(0)} = 0$ mert $v$ sebesség átlaga 0

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




$$= 2\frac{k_B T}{m} \int_0^t ds \int_0^s ds'\, e^{-\gamma(s-s')} = 2\frac{kT}{m}\frac{1}{\gamma}\int_0^t ds\,(1 - e^{-\gamma s}) = 2\frac{kT}{m}\frac{1}{\gamma}\left[t - \frac{1}{\gamma}(1 - e^{-\gamma t})\right]$$

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

$t \ll \frac{1}{\gamma}$ $\quad \gamma t \ll 1$

$e^{-\gamma t} = 1 - \gamma t + \frac{1}{2}\gamma^2 t^2$

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

értelmezés: $\overline{(v_0 t)^2} = v_0^2 t^2$

$$v_0 \simeq \frac{k_B T}{m}$$

relatív becslés $mv = kT$

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

$$\overline{(x(t) - x(0))^2} \simeq 2\frac{k_B T}{\gamma m} t$$

Brown-mozgás diffúziós együtthatója. $D = \frac{k_B T}{\gamma m} = \frac{kT}{\gamma}$

## mozgékenység

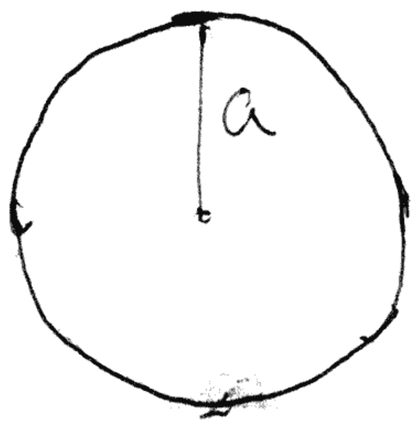
$$m\dot{v} = -\gamma m + f$$

végsebesség: $v = \frac{1}{\gamma} A$ $\qquad \frac{1}{\gamma} = \mu$ mozgékenység

$$\boxed{D = \frac{k_B T}{\gamma}} \in \text{Einstein reláció} \rightarrow \boxed{D = kT\mu}$$

- $\gamma v$: Stokes törvény

$\gamma = 6\pi\eta a$ $\qquad a$: sugár




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

Brown-mozgás elektromos vezetés leírására

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{\xi}{m} + \frac{eE(t)}{m}$$

Stacionárius állapot:

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

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

$$j = nev \qquad \text{"sűrűség"} \qquad = \frac{ne^2}{m} \int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma(t-t')} E(t') dt'$$

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

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

$\frac{1}{\gamma} = \tau$ relaxační čas

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

stac. děl

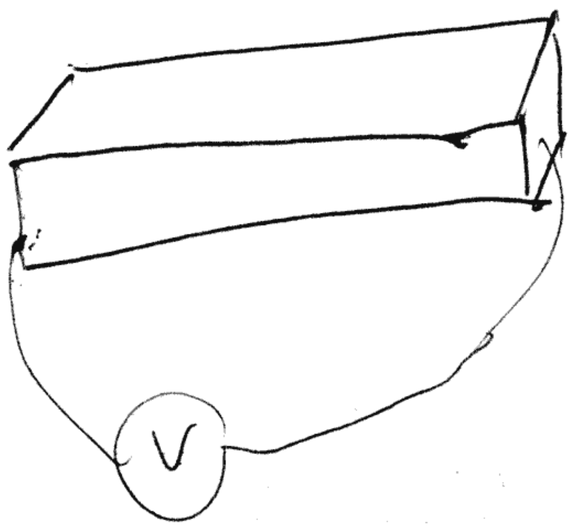
$E = e$

$$\overline{j(t)\,j(0)} = e^2 n \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma|t-t'|} = 2\frac{e^2 n}{m}\frac{1}{\gamma} k_B T \underbrace{\frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-t'|}}_{\gamma \to \infty \;(\tau \to 0)}$$

$\delta(t-t')$

dlaserový frekvenční $\omega < \gamma$

$$\overline{j(t)\,j(0)} \cong 2\sigma_0 k_B T \delta(t)$$




$$\frac{U(t)}{L} = \frac{j(t)}{\sigma_0}$$

$$U(t) = L\frac{j(t)}{\sigma_0}$$

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

BLA

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

$$= 2LA\frac{L}{A\sigma_0} k_B T \delta(t) = \underbrace{2VR\, k_B T \delta(t)}$$

Nyquist-ův (Johnson-ův)

## lineáris oszcillátor T hőmérséklet mellett Langevin-egyenlet

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

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

stacionárius állapotot vizsgáljuk

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

↑ külső erő

Fourier-transzformált

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

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

válaszfüggvény:

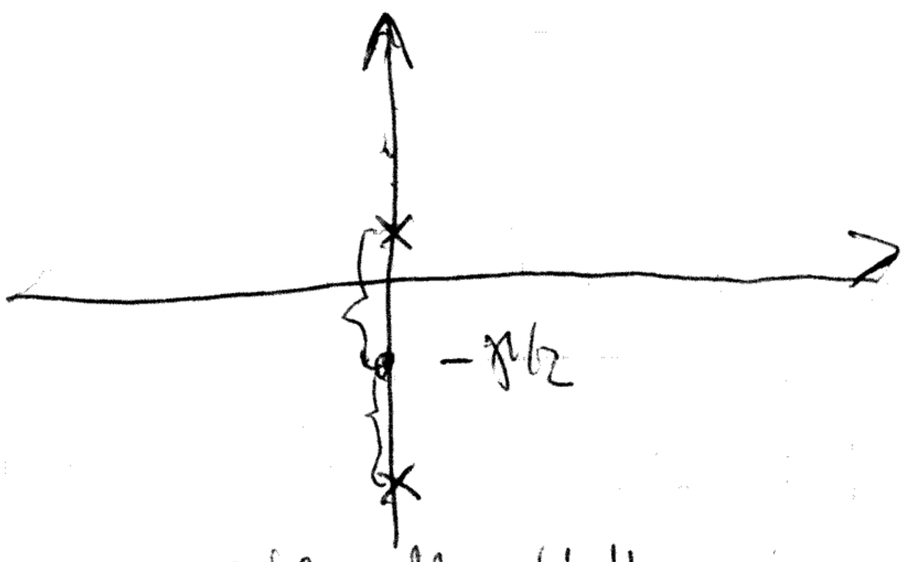
$$\bar{x}_\omega = \underbrace{\frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2}}_{\chi(\omega)} f_\omega$$

Példa:

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

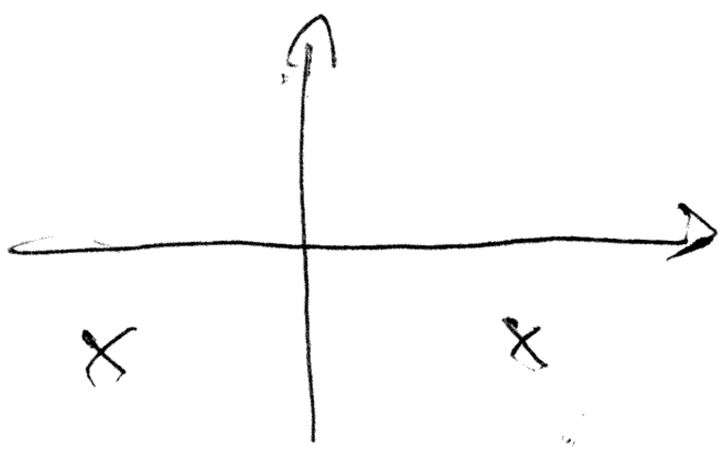
$$\omega = \frac{-i\omega \pm \sqrt{-\gamma^2 + 4\omega_0^2}}{2} = -\frac{i\gamma}{2} \pm \sqrt{\omega_0^2 - (\gamma/2)^2}$$

$\omega_0^2 < (\gamma/2)^2$




tiszta csillapított

$\omega_0^2 > (\gamma/2)^2$



regével erősítés (zajmérési erősítő lézer-nél lehet nemmi)

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

C-t vehetem a valós-ra

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

C-t vehetem a való-ra

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

Kell legyen reprezentáló:

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

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

Ez nyilván lámni más lézer-re is igaz.

Pl: zéleton erő Gerjesztő lézer:

$$\overline{\xi(t)\,\xi(t')} = 2\rho m 2\Gamma\,\delta(t-t')$$

$$\downarrow$$

$$2\rho m 2\Gamma\, 2\pi\,\delta(\omega+\omega') = \overline{\xi_\omega\,\xi_{\omega'}}$$

$$\overline{x_\omega\, x_{\omega'}} = \frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2}\,\frac{\xi_\omega}{m}\,\frac{\xi_{\omega'}}{m}\,\frac{1}{\omega_0^2 - i\omega'\gamma - \omega'^2} =$$

$$/\!/ f_\omega = 0 /\!/$$

$$= 2\pi\,\delta(\omega+\omega')\,\frac{2\rho m 2_B T}{|\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2|^2}\,\frac{1}{m^2}$$

$$\overline{x(t)\,x(0)} \quad \text{Wiener-Khinchin tétel}$$

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

Ellenőrizzük a fluktuáció – disszipáció tételt

$$\frac{2\xi_B T}{\omega} \operatorname{Im}\chi = \frac{2\gamma_B T}{\gamma^2} \frac{1}{m} \frac{\omega\gamma}{|\omega_0^2 - i\omega\gamma - \omega^2|^2}$$

A fluktuáció disszipáció tétel ezen alakjából jön az is, hogy

$$\overline{\xi_a \xi_{a'}} = 2\gamma m 2\gamma_B T \, 2\pi \delta(\omega + \omega')$$

04.27.

## Sztochasztikus mezők

Időfüggő paramétertől függ a változó (pl: $\vec{r}$ -től)

példa: hővezetés

$e(\vec{r},t)$ energia – sűrűség

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \vec{j}$$ (mert az energia megmarad)

↑ energia áramsűrűség

Egyegyértelmű egyensúlyban lévő állapothoz visszavezetve:

$$\vec{j} = -D \nabla e$$ (Cattaneo egyenlet)

így a fenti kettő már zárt egyenlet rendszer

feltételezés: lokális egyensúly: Belsőenergia helyi T-től:

$$de = \rho c \, dT$$

Ez a hagyományos hővezetési probléma.

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

Legyenek a leírásban fluktuációk is!

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \vec{j}$$ (az energia tartalma is megm.)

$$j = D_T \nabla e + \underline{\varphi}$$

↑ determinisztikus ↑ klasszikus energia átrendeződés Gauss tétel. Lehet zaj!

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

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

↑ időben és térben gyorsan lecseng ↑ vez. det. összetevőn

meghatározzák → összetevő egyensúlyi tulajdonságaival

$$\frac{\partial e(\underline{r},t)}{\partial t} = +D_T \Delta e(\underline{r},t) - D\,\overline{\underline{\zeta}(r,t)}$$

"zaj"

~ Fourier - transzformáltban:

$$\frac{\partial e(q,t)}{\partial t} = -D_t q^2 e(q,t) - iq\underline{\zeta}(q,t)$$

Konstans eltolás lehetséges: az egyelet az egyensúlyitól való eltérést írja le.

Mivel a ~ Fourier transf. lineáris trigonometrikus.

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

$$\sum_{\alpha\alpha'} \overline{(-iq_\alpha\varphi_\alpha(q,t))(-iq'\varphi_{\alpha'}(q',t'))} = 2Aq^2\delta(t-t') \quad \Leftarrow$$

Ellentétes hullámszámmal megtelelő mennyiségek

$$\frac{\partial \ell(q,t)}{\partial t} = -D_T q^2 \ell(q,t) + \underbrace{(-iq\,\xi(q,t))}_{\xi(q,t)} \qquad (*)$$

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

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

O-U lelegarant $\quad \gamma^{-1} \quad D$

$D_T q^2 \quad A q^2$

Vegyük az O-U terminológiát ígyjük lel.
Vegyük megoldjuk $(*)$-ot:
Stacionárius állapotra:

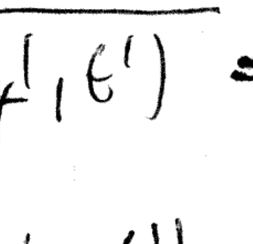
$$\ell(q,t) = \int_{-\infty}^{t} ds\; e^{-D_T q^2 (t-s)}\,\xi(q,s) \qquad //q \neq 0//$$

$$\overline{\ell(q,t)\,\ell(q',t')} = \int_{-\infty}^{t} ds \int_{-\infty}^{t'} ds'\, e^{-D_T q^2 (t-s)}\, e^{-D_T q'^2 (t'-s')}\,\overline{\xi(q,s)\,\xi(q',s')}$$

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

$\uparrow$ volt a Brown mozgásnál

A meghatározása: kapcsolat egy egyensúlyi várható értékkel!




tökegatlan az energiafluktuáció $\overline{\Delta E^2} = 2_B T^2 C = k_B T^2 \rho C V$
(egyensúlyi termodinamika)

$$\overline{\Delta E^2} = \int \delta e(\underline{r},t)\,d^3r \int \delta e(\underline{r}',t)\,d^3r' =$$

$$= \int d^3r\,d^3r' \overline{\delta e(\bar{r}t)\;\delta e(\bar{r}'t)} = V \int dr \lim_{q\to 0} \frac{A}{D_T} \underbrace{e^{-D_T q^2 |t-t'|}}_{\downarrow\ 1}$$

azonos idejű korrelátor
$(\bar{r}-\bar{r}')$-től függ

$$= V \frac{A}{D_T}$$

ha $t = t'$

$$\overline{e(q,t)\,e(-q,t)} = \frac{A}{D_T}$$

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

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

$$\Lambda = \xi_B T^2 \rho c\, D_T = \xi_B T^2 \lambda$$

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

$$e^{-\int d^3r \frac{|\delta e(r)|^2}{2k_B T^2 \rho c}} \sim P(\delta e(r))$$

↑
lokálisan érvényesül az egyensúlyi statisztika,
és mivel a korrelációk nem keverednek
a különböző régiók összetartoznak.

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

Időbeli Fourier transzformált:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_T q^2 |t-t'|} e^{i\omega t}\,dt\; \xi_B T^2 \rho c = \int_0^{\infty} dt\, e^{-D_T q^2 t} e^{i\omega t} + \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{D_T q^2 t} e^{i\omega t}$$

$$= k_B T^2 \rho c \left( \frac{2D_T q^2}{D_T^2 q^4 + \omega^2} \right)$$

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

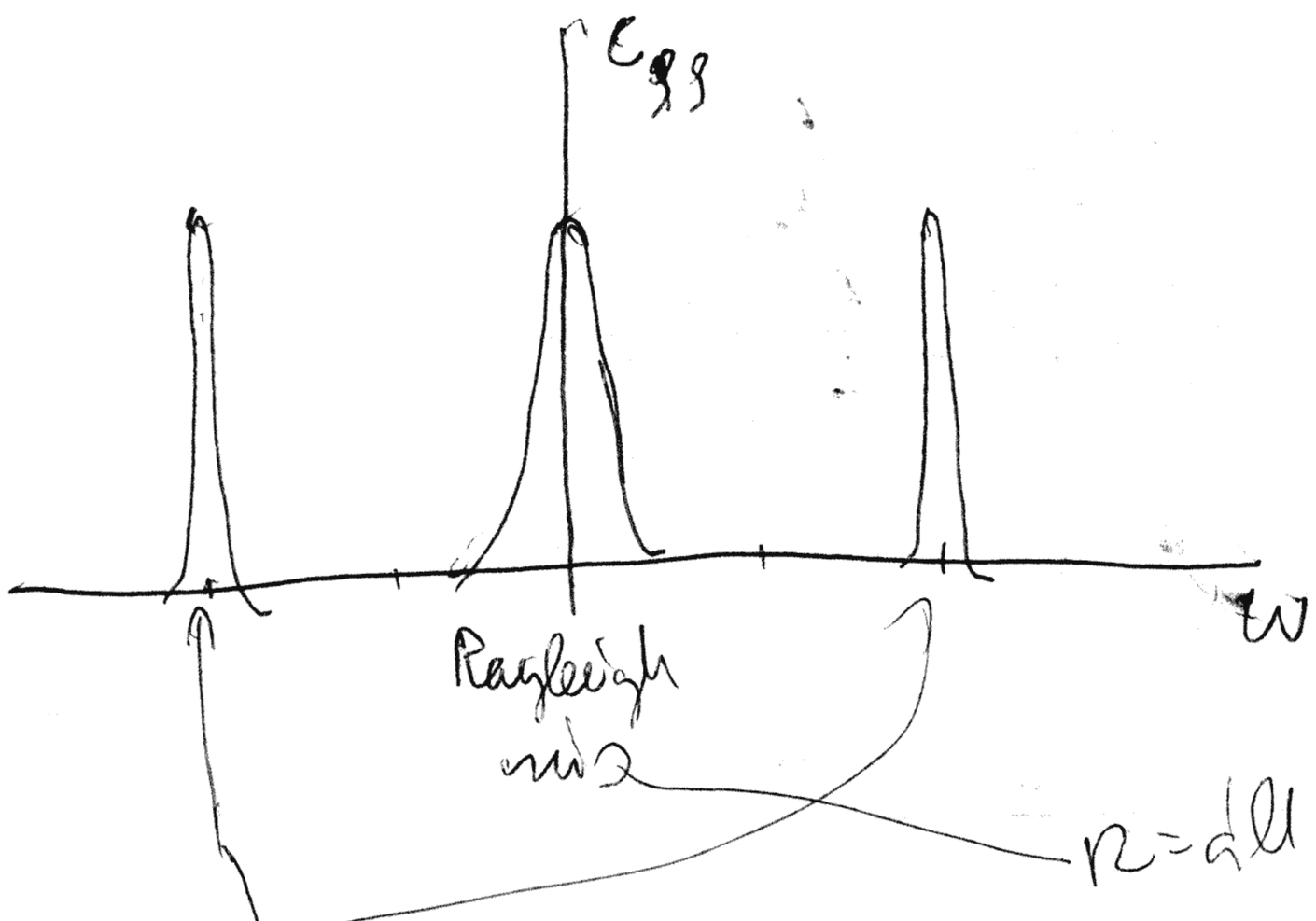
$\times D_T q^2$ lélegtől nélkülözhető

Hogyan lehet mérni?

Rétegzés ⟶ rúzó rétegmozgások

↓

Rayleigh-csúcs a rúzóra ker. hőm-ből
(lökéshullám)




Lézer : dll : hődinamikára ⟶ kontinuitás
Navier Stokes
klasszikus fizika törvényei
entrópia egyenlet

Hajtóerőlen lineáris folyamatok
Onsager - relációk

$\underline{x} = (x_1 \dots x_i \quad x_n)$ diszkrét változók

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

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

kanonikus rendszer: $\phi = \frac{F(\underline{x})}{2BT}$

hajtóerő: $X_i = \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$

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

↑ kinetikus együtthatók

$\overline{\xi_i} = 0$

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

↑ szimmetrikus biztosítja hogy stacionárius eloszlás $\phi(x)$

$L_{ij} = L_{ij}^{(S)} + L_{ij}^{(A)}$

$L_{ij}^{(S)} = \frac{L_{ij} + L_{ji}}{2}$ $\quad L_{ij}^{A} = \frac{L_{ij} - L_{ji}}{2}$

mikroszkópikus dinamika: időtükrözésre invariáns.

$\overline{x_i(t)\ x_j(0)} = \varepsilon_i \varepsilon_j \overline{x_i(-t)\ x_j(0)} = \varepsilon_i \varepsilon_j \overline{x_j(t)\ x_i(0)}$

↑ időtükrözött (stacionárius állapotban!!)

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

Behozva a mozgásegyenletet:

$-\sum_\ell L_{i\ell} \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_\ell}(t)\ x_j(0)} + \overline{\xi_i(t)\ x_j(0)} \overset{t>0}{=} -\sum_\ell L_{i\ell} \overline{x_\ell(t)\ x_j(0)}$

$t>0$ függetlenül: $\overline{\xi_i(t)}\ \overline{x_j(0)} = 0$

$$\pm -\sum_\ell L_{i\ell} \overline{X_\ell(t)\, x_j(0)} \xrightarrow[t\to 0]{} -\sum_\ell L_{i\ell}(0)\, \overline{x_\ell(0)\, x_j(0)} = -L_{ij}$$

↑ egyenértékű átlag $\delta_{\ell j}$

$$\overline{X_\ell x_j} = \frac{\int dx_1 \dots dx_n\, e^{-\phi(x)} \frac{\partial \phi}{\partial x_\ell} x_j}{\int dx_1 \dots dx_n\, e^{-\phi(x)}} = \delta_{\ell j}$$

$$\int dx_\ell\, e^{-\phi(x)} \frac{\partial \phi}{\partial x_\ell} x_j = -\left[e^{-\phi} x_j\right]_{x_\ell=-\infty}^{x_\ell=+\infty} + \int dx_{\ell\neq} e^{-\phi(x)} \underbrace{\frac{\partial x_j}{\partial x_\ell}}_{\delta_{\ell j}}$$

$-\frac{\partial}{\partial x_\ell} e^{-\phi}$

0

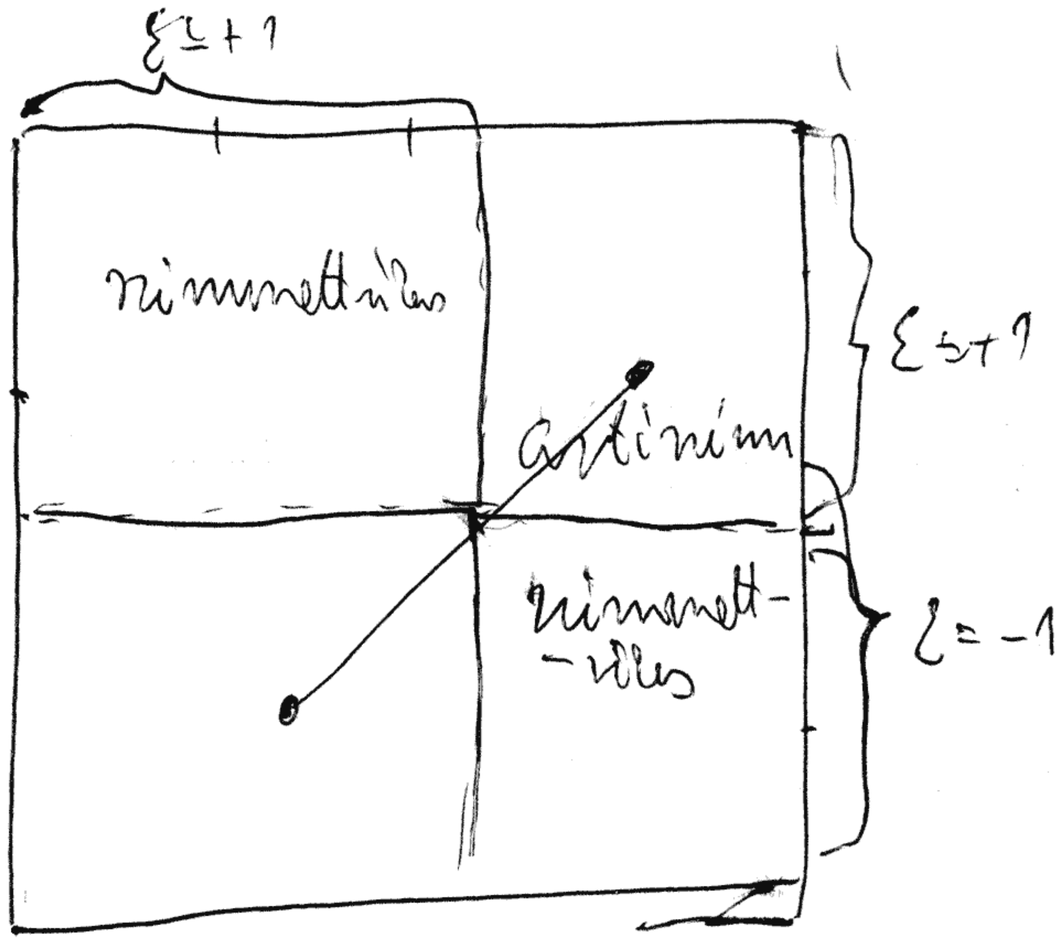
természetes határfeltétel
$e^{-\phi} \to 0 \quad (x_\ell \to \pm\infty)$

$$= \delta_{\ell j} \int dx_\ell\, e^{-\phi(x)}$$

Végtelen: $-L_{ij} = \varepsilon_i \varepsilon_j (-L_{ji})$

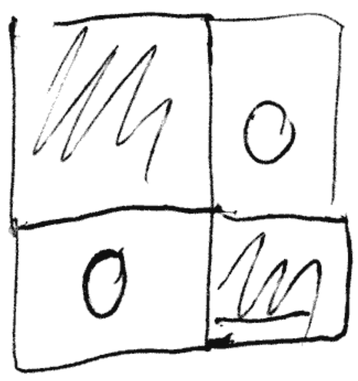
$$\boxed{L_{ij} = \varepsilon_i \varepsilon_j L_{ji}}$$

időtükrözési szimmetria
következménye: Onsager
reciprocitás!



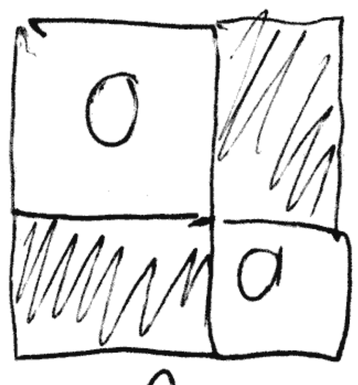

Lij mátrix

$$L_{ij} = L_{ij}^{(S)} + L_{ji}^{(AS)}$$



$L_{ij}^{(S)}$

diminatív
kölcsönhatás



$L_{ij}^{(AS)}$

Konzervatív
kölcsönhatás

05.04. Ugró folyamatok

Határ tér n (egész)

$p_1(n,t)$

1 1 1 1 1 1 1 1

$P(n\,t|m)$ ↑ int. hossz

Markov-folyamat

$$p_1(n,t) = \sum_m P(n\,t|m)\, p_1(m,0)$$

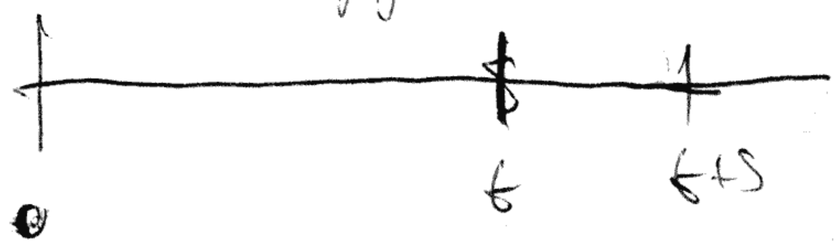
$$\underbrace{\qquad\qquad}$$

$p_2(n,t,m,0$

Chapman-Kolmogorov:

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

Általános diff. egyenletre:




$$p_1(n,t+\Delta) = \sum_m P(n,\Delta|m)\, p_1(t,m)$$

$\Delta \to 0$ feltevés: $\delta_{nm} + \Delta\, W_{nm} + o(\Delta)$

$n \neq m \;\Rightarrow\; W_{nm} \geq 0$ átmeneti valószínűség

$n = m \;\Rightarrow\; 1 + W_{mm} \geq 0 \;\Rightarrow\; W_{mm} < 0$

$$1 + W_{mm}\Delta = 1 - \sum_{n\neq m} W_{nm}\Delta$$

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

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

$$\frac{dp_1(n,t)}{dt} = \sum_m W_{nm} p_1(m,t) = \sum_{\substack{m \\ (m \neq n)}} W_{nm} p_1(m,t) - \sum_m W_{mn} p_1(n,t)$$

Master- egyenlet.

— c —

Diszkret idejű valtozat $t = \ell\tau$ $\ell = 0, 1, 2, \ldots$

$$p_1((\ell+1)\tau) = \sum_m W_{nm} p(m, \ell\tau)$$

$$\sum_n W_{nm} = 1$$

$$W_{nm} = P(n, \tau | m)$$

m sztochasztikus mátrix.

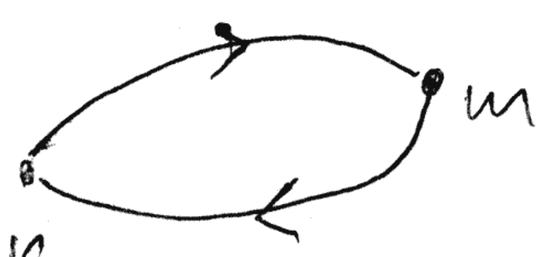
— o —

Vissza a lehetőséghez.

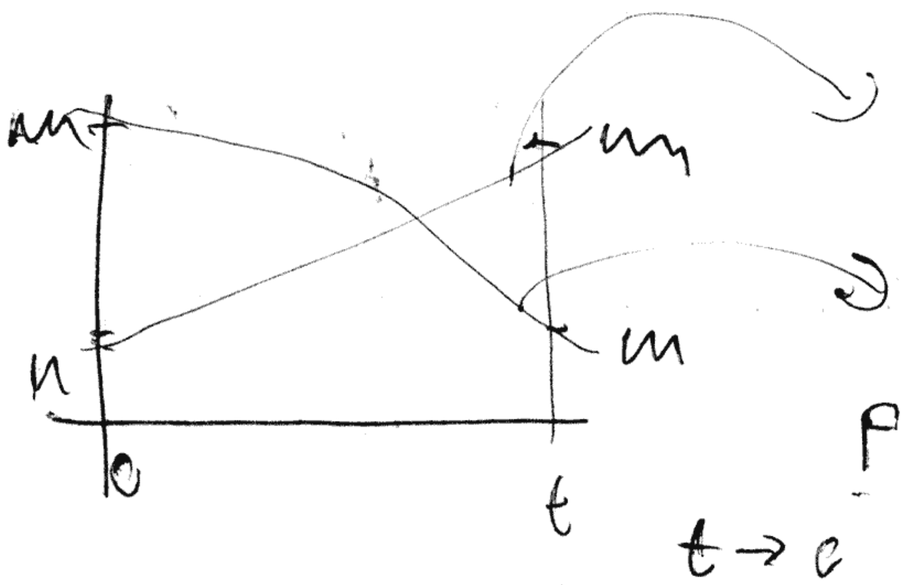
stacionárius állapot: $p_s(n)$

$$\sum_{\substack{m \\ m \neq n}} (W_{mn} p_s(m) - W_{nm} p_s(n)) = 0$$

részletes egyensúly: $W_{mn} p_s(m) = W_{nm} p_s(n)$




Ha a stacionárius állapot időtükrözés- invariáns ⇒ részletes egyensúly




$p_2(m, t, n, 0)$
$p_2(n, t, m, 0)$ } n ⇌ m időtükrözés.

$$P(m,t|n) p_s(n) = P(n,t|m) p_s(m)$$

$$W_{mn} p_s(n) = W_{nm} p_s(m)$$

Stabilak-e a stacionárius /egyensúlyi/ eloszlások?
Ha igen, hány ilyen van?

## H-TÉTEL

$p_s(n)$ stacionárius eloszlás
(Ennek áll a részletes egyensúly $W_{nm} p_s(n) = W_{mn} p_s(m)$
A lépéstér nem szeparálható.
ugyanis → Bármely két állapot között van átmenet
véges sok lépésben.

$\Rightarrow$ $p_s(n)$ stabil stacionárius állapot.

Bizt:

$$H = \sum_n p(n,t) \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)}$$ — stacionárius

$p_s(n)$ sehol sem 0:
→ Kell legyen 1 db nem 0
→ a vele összekötött a részletes egyensúly miatt mind nem nulla.

$H \geq 0$ mert:

$$H = \sum_n \left( p(n,t) \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)} - p(n,t) + p_s(n) \right) =$$

$$= \sum_n p_s(n) \left[ \frac{p(n,t)}{p_s(n)} \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)} - \frac{p(n,t)}{p_s(n)} + 1 \right] \geq 0$$

$x \ln x - x + 1$




$f(x=1) = 0$

$f'(x) = \ln(x)$

$f''(x) = 1/x > 0$

$H \geq 0$
és $H=0$ $\Leftrightarrow$ minden tag 0 $x=1$ $\frac{p(n,t)}{p_s(n)} = 1$

Belátjuk $\dot{H} < 0$ :

$$\dot{H} = \sum_n \left( \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)} + 1 \right) \dot{p}(n,t) = \left\{ \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)} \left( W_{nm} p(m,t) - W_{mn} p(n,t) \right) \right.$$

$\sum_n \dot{p}(n,t) = 0$

egyenlőség

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

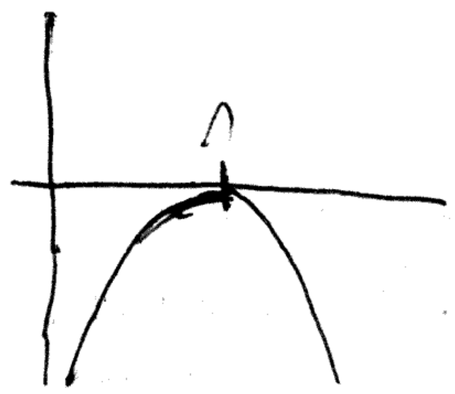
$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} \left[ W_{nm} p(m,t) \ln \left( \frac{p(n,t)}{p_s(n)} \frac{p_s(m)}{p(m,t)} \right) - W_{mn} p(n,t) \ln \frac{p(n,t)}{p_s(n)} \frac{p_s(m)}{p(m,t)} \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n,m} \left( W_{nm} p(m,t) - W_{mn} p(n,t) \right) \left( \ln p(n,t) - \ln p(m,t) \right)$$

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

adódik: $\frac{W_{mn}}{W_{nm}} = \frac{p_s(m)}{p_s(n)}$

$f(x) = \ln x (1-x) \leq 0$



$\dot{H} \leq 0$

"=" $\Leftrightarrow x = 1$

Hasonlóan $\dot{H} \equiv 0$

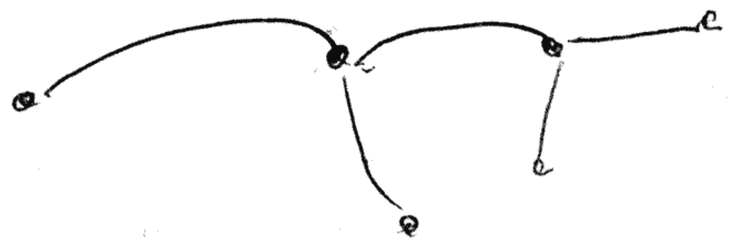
$\dot{H} = 0$

tagonként:

$W_{nn} = 0$ ?

vagy $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = 1$ $\quad \frac{p(n,t)}{p_s(n)} = \frac{p(m,t)}{p_s(m)}$

Annak szemléltetésére, hogy a H állapotban a hányadosok megegyeznek:



$$\frac{p_0(n,t)}{p_s(n)} = \text{áll} \xrightarrow[\text{normálás}]{} \underline{\underline{p(n,t) = p_s(n)}}$$

tehát:

$H \geq 0 \qquad \dot{H} \leq 0$

H-ra van határérték $\lim t \to \infty$

Ha valahol $\dot{H} \to 0$ akkor $H \to 0$

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

---

A H függvény választásai is lehet önkényes minden olyan lehet- jó, hogy

$$H = \sum_n p_s(n)\, f\left(\frac{p(n,t)}{p_s(n)}\right) \qquad \left.\begin{matrix} f(x) \geq 0 \\ f''(x) > 0 \end{matrix}\right\} \; x > 0$$

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

← de jó annyiban is, mert: független rendszerre additív

← kapcsolat az entrópiával.

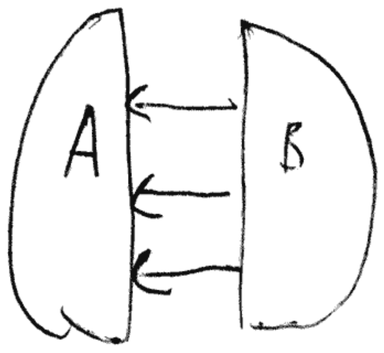
---

Ha nincs átmenet, lehet H-a lázadóz reprezentálódik:




A és B között nincs átmenet.

Külön-külön kiszámolható




$B \to A$ átmenet van

$A \to B$ átmenet nincs.

Zárt rendszer

$\Omega$: energia sajátállapotok $E_n$ energiával.

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

részletes egyensúly: $W_{nm} = W_{mn}$ $\quad E_n, E_m \in [E, E+\delta E]$

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

$\left( E_n \in [E, E+\delta E] \right)$

$$\partial_t H = \underbrace{\partial_t \ln \Omega(E, \delta E)}_{0} + \partial_t \sum_n p(n,t) \ln p(n,t)$$

$S_{mikro}$ $\quad - \quad S[p(n,t)]$

↑ mikrokanonikus entrópia

↑ információs entrópia

$H \geq 0$ : $\quad S_{mikro} \geqq S[p(n,t)]$

$\dot{H} \leqq 0$ : $\quad \dot{S}[p(n,t)] \geqq 0$

$H \to 0$ Miatt $S[p(n,t)] \to S_{mikro}$.

— c —

Hamilton dinamikában ez nincs így ( idő tükr.)

— o —

kanonikus sokaság (T körüli ing. lé zeg)

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

$$W_{nm} e^{-\beta E_m} = W_{mn} e^{-\beta E_n}$$

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

$$H = \sum_i p(n,t) \ln\left(p(n,t) Z e^{\beta E_n}\right) =$$

$$= \sum p(n,t) \ln p(n,t) + \ln Z \underbrace{\sum_n p(n,t)}_{1} + \beta \sum_n E_n(p_{n_2},t)$$

$$k_B T H = E[p(n,t)] - TS[p(n,t)] - F_{kanonikus}$$

$$k_B T H = F[p(n,t)] - F_{kanonikus}$$

$$\dot{H} \leqq 0$$

$$\dot{F}[p(n,t)] \leqq 0 \qquad F[p(n,t)] \longrightarrow F_{kanonikus}$$

Monte-Carlé eljárás a Master egyenlethez

$p_s(n)$ adott

Olyan eljárást akarunk amivel az egyensúlyi eloszlás lesz.

$W_{n,m}$ — időben egyensúly
— nem reprezentálható tárolóban.

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

↑ ± kiválasztásra ↑ elfogadás-e az átmenetet

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

↑ Ha kanonikus sokaságot használunk.

## Metropolis – algoritmus

N db állapot

$$g(m\to n) = \frac{1}{N}$$

elfogadás:

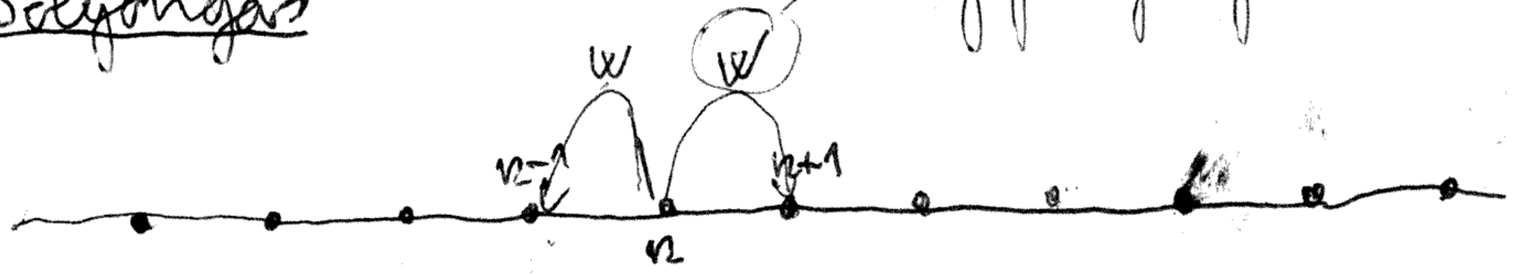
$$A(m\to n) = \begin{cases} 1 & \text{ha } E_n < E_m \\ e^{-\beta(E_n - E_m)} & \text{ha } E_n > E_m \end{cases}$$

normálás:

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

05.11.

Bolyongás




Master-egyenlet:

$$\dot{p}_n(t) = W(p_{n+1}(t) + p_{n-1}(t)) - 2W p_n(t)$$

$$\dot{p}_n(t) = W(p_{n+1}(t) + p_{n-1}(t) - 2p_n(t)) = 2W\left(\frac{p_{n+1}(t)+p_{n-1}(t)}{2} - p_n\right)$$

↓ Kerni időt után szinte elenyészt változik

Hol van a részecske $t$ idő pillanatban?

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

$$\dot{\bar{n}}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\, \dot{p}_n(t) = \sum_{n} (n(p_{n+1}) + n p_{n-1} - 2n p_n) W =$$

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

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

$$= W(\bar{n} - 1 + \bar{n} + 1 - 2\bar{n}) = 0$$

Átlagosan sehova nem mozdul el. $\bar{n}(t) = \bar{n}(0)$

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

$$\dot{\overline{n^2}}(t) = \sum_{n} (n^2 \cdot p_{n+1} - n^2 p_{n-1} - 2n^2 p_n) W =$$

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

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

$$= W(\overline{n^2} - 2\bar{n} + 1 + \overline{n^2} + 2\bar{n} + 1 - 2\overline{n^2}) = 2W$$

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

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

Induló: $\bar{n}(0) = 0$ $\quad \overline{n^2(0)} = 0$

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

Időben: $\overline{n^2(t)} = 2Wt$

Szerdi valószínűségi változó bolyongást végez $\quad x = na$

$\bar{x} = 0$

$\overline{x^2} = 2Wa^2t$

diffúziós állandóval $\quad D = Wa^2$

(diff. egyenlettel)

$p_n(t) = ?$

$$F(z,t) = \sum_n z^n p_n(t)$$

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

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

$$F(z,t) = F(z,0)\, e^{W\left(\frac{1}{z}+z-2\right)t}$$

$$F(z,0) = \sum_n z^n p_n(0)$$

A generátor függvényből momentumok számíthatók (deriváltak $z=1$ helyen)

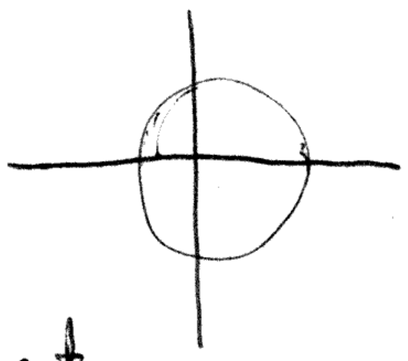
$$F(z=1,\ t) = 1$$

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

$$\left.\frac{\partial^2 F}{\partial z^2}\right|_{z=1} = \sum n(n-1)p_2 = \overline{n^2} - \bar{n}$$

$$\frac{1}{\ell!}\frac{\partial^\ell F}{\partial z^\ell}\Big|_{z=0} = P_\ell(t)$$

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



Speciális eset
$P_n(0) = \delta_{n,0}$

$$F(z,0) = \sum_n z^n \delta_{n,0}$$

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

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

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

$$= \frac{e^{-2wt}}{2\pi}\int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\exp\left[w\left(e^{-i\varphi}+e^{i\varphi}\right)t\right]}{e^{in\varphi}}\,d\varphi =$$

$$= \frac{e^{-2wt}}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\, e^{-in\varphi}\, e^{2wt\cos\varphi} =$$

$\cos n\varphi - i\sin n\varphi$

↓

nemad járulékot (páratlan)

$$= \frac{e^{-2wt}}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\, \cos n\varphi\, e^{2wt\cos\varphi} =$$

$$= \frac{e^{-2wt}}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi\,(\cos n\varphi)\, e^{2wt\cos\varphi}$$

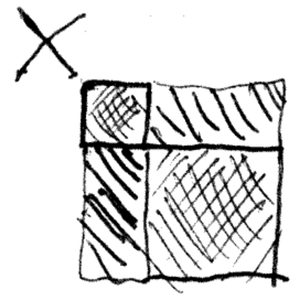
↑ nem nulla tag.

$$I_n(z) = i^{-n} J_n(iz)$$

módosított Bessel fgv.

integrál előállítás:

$$I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{z\cos\vartheta} \cos(n\vartheta)\, d\vartheta$$



$$\rho_n(t) = e^{-2\omega t} I_n(2\omega t)$$

Aszimptotikus formula:

$$I_n(z) \cong \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} (1 + O(1/z)) \qquad (z \gg 1)$$

↑ n-től függ

$\infty$ rendben lézeltére

<u>Periodikus határfeltétel</u>

majd $L \to \infty$

Fourier-transzf.:

$$\rho_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{iqna} \rho_q$$

$$\rho_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{q/N} e^{-iqna} \rho_n$$

$$q = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N} \qquad -\frac{N}{2} < m < \frac{N}{2}$$

$$-\pi/a < q < \pi/a$$

$$\dot{\rho}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} e^{-iqna}\, \omega (\rho_{n+1} + \rho_{n-1} - 2\rho_n) =$$

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

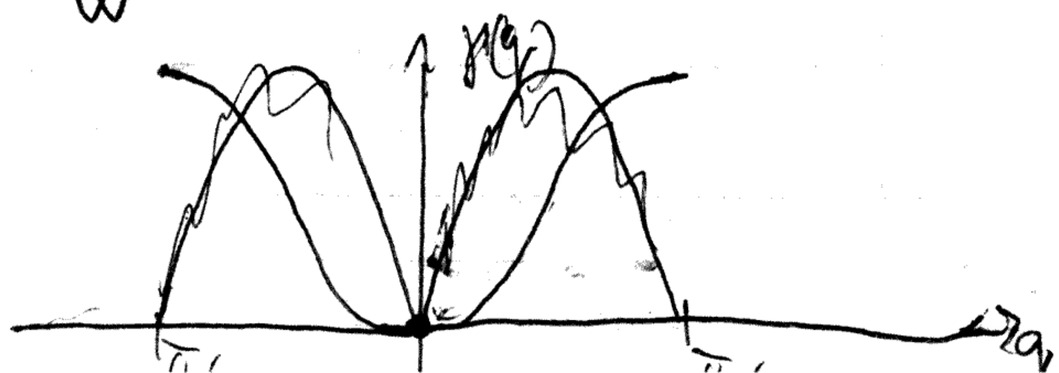
$$= (e^{iqa} + e^{-iqa} - 2)\, \rho_q \omega$$

$$-2(1-\cos qa) \overset{\text{jel}}{=} -\frac{\gamma(q)}{\omega}$$

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

$$\dot{\rho}_q = -\gamma(q)\rho(q)$$

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



Speciális megoldás: $p_n(t=0) = \delta_{n,0}$

$$p_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{iqna} \delta_{n0} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$$p_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqna} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-\gamma_q(t)}$$

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

Termodinamikai határeset: $N \to \infty$

$$p_n(t) = \frac{Na}{2\pi} \int dq \dots$$

$$p_n(t) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq\, e^{iqna} e^{-2w(1-\cos(qa))t} =$$

$\varphi \equiv aq$

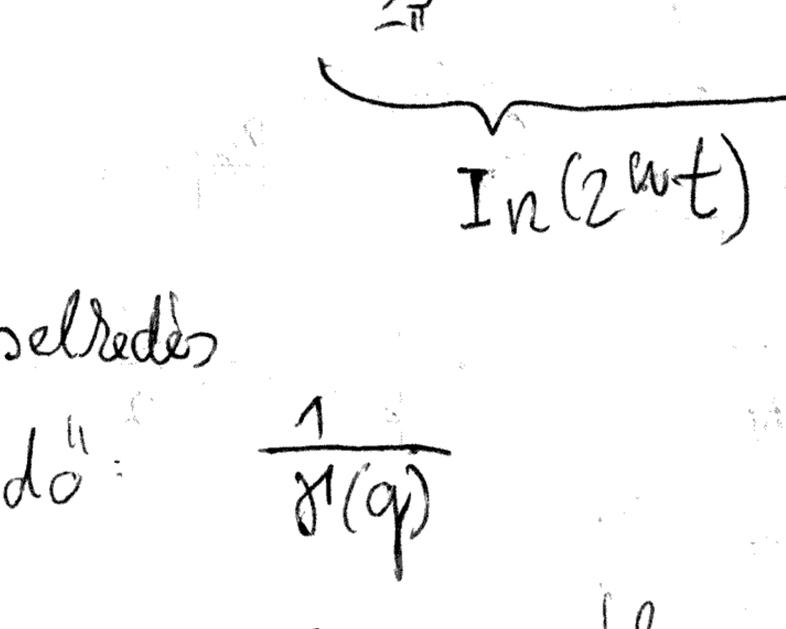
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\varphi} e^{t 2wt \cos\varphi} e^{-2wt} = I_n(2wt)\, e^{-2wt}$$

$I_n(2wt)$

hosszú idejű viselkedés

relaxációs idő: $\frac{1}{\gamma(q)}$

$q \to 0$ nál $1/q^2$ szerint divergál




elegendő ezeket nézni

$t > t_0$ esetén elegendő a $\gamma(q) < 1/t_0$ komponenseket számításba venni.

$$p_n(t) \cong \frac{a}{2\pi}\int_{-q_0}^{q_0} dq\, e^{iqna}\, e^{-Wa^2q^2t} \cong \frac{a}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq \cos(qna)\, e^{-Wa^2q^2t} =$$

$\cong$: aszimptotikusan igaz

$e^{-Wa^2q^2t}$: gyorsan lecsúg $\Rightarrow$ elvihető a határt végtelen

$\cong$: sin nélkül

integrál tábla:

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

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

Gauss elenlás. valószínűség

$(na)^2 = 2Wa^2t \qquad D = Wa^2$

brownmozgás Lemperensen $\rightarrow$ vonca függvény $\rightarrow$ Wiener folyamat.

Másképp is eljuthatunk a Wiener-folyamathoz:

$$\dot{p}_n(t) = W\left(p_{n+1}(t) + p_{n-1}(t) - 2p_n(t)\right)$$

kontinuum határeset: ——— ha tekintünk az elmélet időbeli lefolyását

$$p_n(t) \cong a F(x=na,t) \qquad F(x,t) \text{ lassan változó fv.}$$

(a sokszínűség térben)

$$p_{n\pm1}(t) \cong a F(x=na\pm a,t) = a\left(F(x=na,t) \pm F'(x=na,t)a + \frac{1}{2}F''(x=na,t)a^2 \ldots\right)$$

$$\dot{p}_n(t) = a\dot{F}(x=na,t) = a\left(F''(x=na,t)\,a^2W\right)$$

$$\boxed{\frac{\partial F(x,t)}{\partial t} = aW^2\frac{\partial^2 F(x,t)}{\partial x^2}}$$

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

$D = Wa^2$

Ha tetszőleges kezdőérték van, de végre valódi értékkel, akkor keverő lesz.

# fermion-gáz Boltzmann-egyenlete

egyrészecske
kvantumszámok: $a$ (pl: elektron spin
vmennyi: $a = (\vec{p}, \sigma)$
impulzus, spin

betöltési számok: $n_a = 0, 1$

gáz állapotai: $A = \{ \dots n_a \dots \}$

master-egyenlet $p(A,t)$

$$\frac{\partial p(A,t)}{\partial t} = \sum_{\substack{A' \\ A' \neq A}} \left( W(A,A') p(A') - W(A',A) p(A,t) \right)$$

Kérdés: a betöltési számok várható értéke hogyan változik időben.

$$\overline{n_a} = \sum_A p(A,t)\, n_a(A)$$

$$\dot{\overline{n}}_a = \sum_A n_a(A)\, \dot{p}(A,t) = \sum_{AA'} \left( W(A,A') p(A') n_a(A) - W(A',A) p(A) n_a(A) \right)$$

$$\dot{\overline{n}}_a = \sum_{\substack{AA' \\ A=A'}} W(AA')\, p(A') \left( n_a(A) - n_a(A') \right)$$

Mást nincs ort.-diag!

Pauli-rendszer → Master → Boltzmann

redukált elemi hipotézis

elemi fok. hierarchia

elvégzik végig kevés

L részecske endelő (N-L) nem ezekre átlag

2 részecske = 1 részecskével mozgat

Mi lesz W?

→ nemnegatívak az elemeken

→ átlépés

2 1 értékű $n \longrightarrow 0$

2 0 értékű $n \longrightarrow 1$

→ csak olyan állapotok ~~vannak~~, ahol a maradékfüggvény adható

# Boltzmann egyenlet

Fermion gáz

$A = \{ \ldots n_a \ldots \}$ ahol: $a = (k, \sigma)$

$$\dot{P}(A,t) = \sum_{A'} \left( W(A,A') P(A',t) - W(A',A) P(A,t) \right)$$

$(A' \neq A)$

$$\overline{n_e} = \sum_A P(A)\, n_e(A)$$

$$\dot{\overline{n}}_e = \sum_{AA'} W(A,A') P(A') \left( n_e(A) - n_e(A') \right)$$

$A \neq A'$

$W(A,A') \neq 0$ ha 1 db részecske különböztatja meg az állapotokat.

Ezek az esetek kell figyelembe venni db különbözik

(i) $A = \{ \ldots \overset{b}{c} \ldots \overset{a}{1} \}$ (ii) $A = \{ \ldots \overset{b}{1} \ldots \overset{a}{\sigma} \ldots \}$

$A' = \{ \ldots 1 \quad \sigma \}$ $A' = \{ \ldots \sigma \ldots 1 \ldots \}$

$b \to a$ $a \to b$

$n_b(A) - n_b(A') = -1$ $n_b(A) - n_b(A') = 1$

Az $A$-ra való összegzésnél elég megadnia részállapotot.

1 részecske $A \to B$

$$\sum_a W(b,a) \sum_{A'} P(A') \left( 1 - n_b(A') \right) n_a(A')$$

$n_a(A')(1 - n_b(A'))$

nemző: $n_a \neq 1$

az indulási nemzés

A másik átmenet tipus járuléka:

$$\sum_a' w(a,b) \sum_{A'} P(A') (1-n_a(A')) n_b(A')$$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a) \underbrace{\sum_{A'} P(A') (1-n_b(A')) n_a(A')}_{\overline{(1-n_b) n_a}} - \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(a,b) \underbrace{\sum_{A'} P(A') (1-n_a(A')) n_b(A')}_{\overline{(1-n_a) n_b}}$$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} \left( w(b,a) \overline{(1-n_b) n_a} - w(a,b) \overline{(1-n_a) n_b} \right)$$

spec. eset: szórásos szennyezőkön

$$W_{b,a} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_b - \varepsilon_a) |\langle b|U|a\rangle|^2$$

↑ szórási potenciál

$W_{ba} = W_{ab}$ időtükrözési szimmetria

$$\boxed{\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a) (\bar{n}_a - \bar{n}_b)}$$

lezárási szétcsatolással $\quad \overline{n_b n_a} \approx \bar{n}_b \bar{n}_a$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} w(b,a) (1-\bar{n}_b) \bar{n}_a - w(a,b) (1-\bar{n}_a) \bar{n}_b$$

klasszikus határeset: $\bar{n}_a \ll 1$

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{\substack{a \\ (a\neq b)}} \left( w(b,a) \bar{n}_a - w(a,b) \bar{n}_b \right)$$

# Pet-vérzacske-folyamatok

| | b | $a_1$ | $a_2$ | $a_3$ | |
|---|---|---|---|---|---|
| (i) $A = \{$ | 0 | 0 | 1 | 1 | $\}$ |
| $A' = \{$ | 1 | 1 | 0 | 0 | $\}$ |

$b, a_1 \Rightarrow b, a_3$

(ii) $A \{ \ldots 1 \ldots 1 \ldots 0 \ldots 0 \}$

$A' \{ \ldots 0 \ldots 0 \ldots 1 \ldots 1 \}$

analógia alapján:

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{a_1 a_2 a_3} \Big[ W(b a_1 \to \bar{b} a_1; a_2 a_3) \overline{n_{a_2} n_{a_3} (1-n_b)(1-n_{a_1})} - W(\bar{b} a_1 \to b a_1; a_2 a_3) \overline{n_b n_{a_2} n_{a_3} (1-n_{a_1})} \Big]$$

$b, a_1, a_2, a_3$ különbözők

Szétcsatolással Boltzmann-egyenlet:

$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{a_1 a_2 a_3} W(b a_1, a_2 a_3) \bar{n}_{a_2} \bar{n}_{a_3} (1-\bar{n}_b)(1-\bar{n}_{a_1}) - W(a_2 a_3, b a_1) \bar{n}_b \bar{n}_{a_1} (1-\bar{n}_{a_2})(1-\bar{n}_{a_3})$$

Klasszikus határeset:

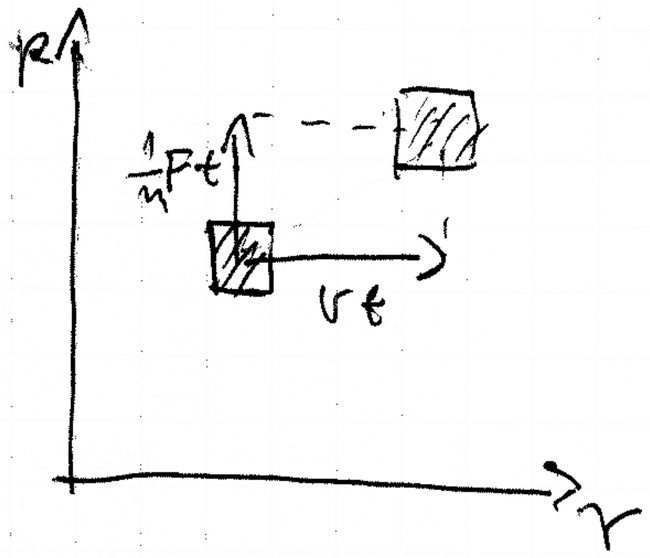
$$\dot{\bar{n}}_b = \sum_{a_1 a_2 a_3}' \Big[ W(b a_1, a_2 a_3) \bar{n}_{a_2} \bar{n}_{a_3} - W(a_2, a_3, b a_1) \bar{n}_b \bar{n}_{a_1} \Big]$$

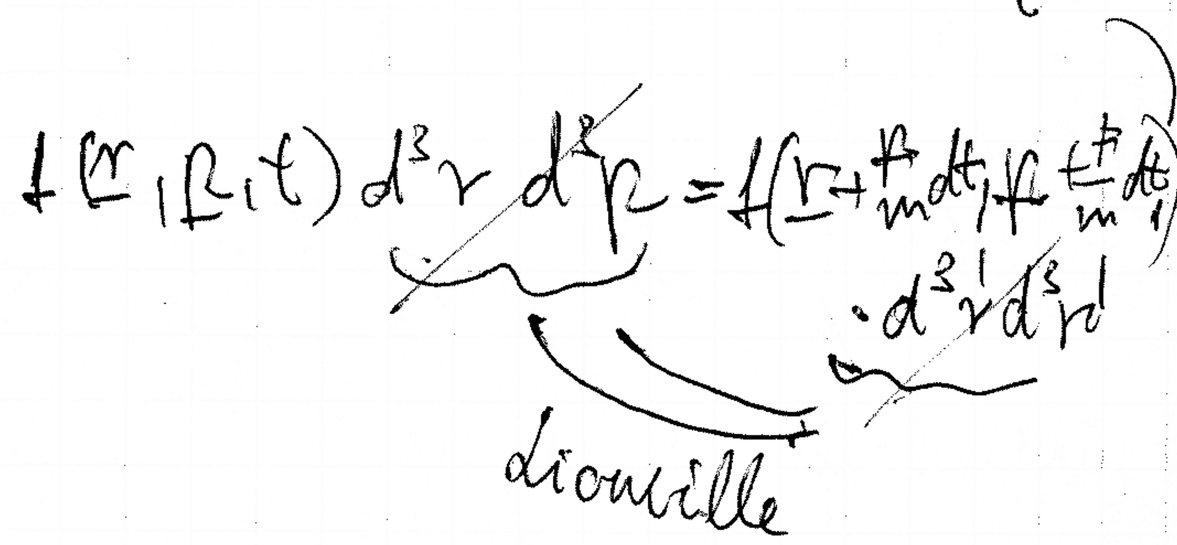
Anyagmennyiség sűrűsége

$f(\underline{r}, \underline{p}, t)$

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\underline{r}, \underline{p}, t) = n(\underline{r})$$

Hasonlóan állítható:




Sorfejtés után

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \frac{\underline{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} \underline{F} = 0$$

$\left(\frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \equiv \nabla_r f\right)$

ütközés mentes Boltzmann-egyenlet.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \frac{\underline{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \underline{p}} \underline{F} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ütk.}}$$

↑ ez nem egyszerűsödik, addig ezzel foglalkoztunk.

Pl. Klasszikus gáz

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int dp_1^3 dp_2^3 dp_3^3 \left( W(p\, p_1 ; p_2 p_3)\, f(r, p_1, t) f(r, p_2, t) \right.$$

$$\left. - W(p_2 p_3 ; p\, p_1)\, f(r, p_2, t) f(r, p_3, t) \right)$$

Pl: $f \ln f$ = H keresztül lehet H - tétel készíteni.

## relaxációs - idő közelítés

$$f_0(\underline{r}, \underline{p}, t)$$

legyen az egyensúlyi megoldás: $\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{ütk} = 0$

$$f = f_0 + g$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk} \approx -\frac{g}{\tau} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

## elektromos vezetés

$$f_0(\varepsilon(\underline{p})) \qquad \varepsilon = p^2/2m$$

stacionárius tér: homogén mágneses homogén $\underline{E}$ tér

$$-e\underline{E}\cdot\frac{\partial f}{\partial \underline{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

gyenge tér: $E$-ben lineáris sorfejtés rendig kell menni.

$$-e\underline{E}\,\frac{\partial f_0}{\partial \underline{p}} = -\frac{f_0}{\tau} \qquad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{p}} = \frac{\underline{p}}{m} = \underline{v}$$

$$f = f_0 - e\tau\,\underline{E}\,\frac{\partial f_0}{\partial \underline{p}} = f_0 + e\tau\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}(\underline{v}\underline{E})$$

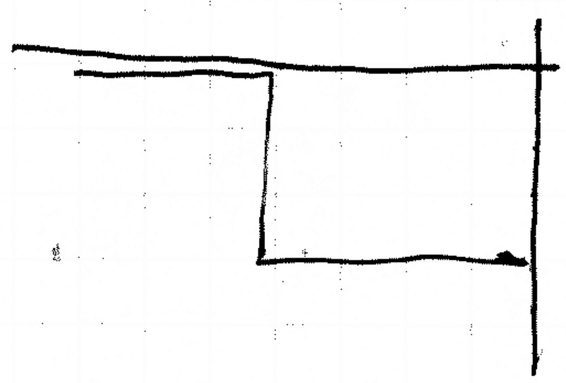
$$\underline{j} = -e\underline{v} = -e\cdot\int d^3p\, f(\varepsilon(p))\frac{\underline{p}}{m} =$$

$$= -e\underbrace{\int d^3p\, f_0(\varepsilon(p))\frac{\underline{p}}{m}}_{0\ (\text{izotrópia})} - e^2\tau\int d^3p\,\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}(\underline{v}\underline{E})\underline{v}$$

$$\underline{j} = \underline{\underline{\sigma}}\,\underline{E}$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2\tau\int d^3p\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)v_\alpha v_\beta$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$




$$\int d\varepsilon \left(\frac{\beta}{4}\right) \sec^2\left(\frac{\beta\varepsilon}{2}\right) = \int d\varepsilon \left(\frac{\beta}{4}\right) \sec^2\left(\frac{\beta\varepsilon}{2}\right)$$

independent.

$$= e^2 \delta_{\alpha\beta} \frac{4}{3} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \tau^2(\varepsilon) \left(\frac{\varepsilon}{m}\right)^2 =$$

$$\vec{=} e^2 \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\varepsilon) \frac{\varepsilon}{m} d(\varepsilon)$$

energies around $\varepsilon_f$

independent

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) v_\alpha v_\beta \tau(\varepsilon) = e^2 \int d\varepsilon \, n(\varepsilon) \frac{v_\alpha v_\beta}{v^2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\varepsilon) =$$

$$\int d\Omega \frac{v_\alpha v_\beta}{v^2} \vec{=} \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} 4\pi$$

$$n \overline{v_\alpha v_\beta} = n \delta_{\alpha\beta} \overline{v_x^2} = n \frac{k_B T}{m}$$

$$\frac{m v_x^2}{2} = k_B T$$

independent of direction

Thermal conductivity

$$\frac{\pi^2}{2mkT}$$

$$k_0 = n C \, e^{\frac{\pi^2}{2mkT}}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{kT} f_0$$

degenerate electron gas $\quad \tau(\varepsilon)$

$$\sigma_{\alpha\beta} = e^2 \int d^3k \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) v_\alpha v_\beta \tau(\varepsilon) = e^2 \int dk \, k^2 \, dk \frac{v_\alpha v_\beta}{v^2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\varepsilon) =$$

$$\int d\Omega \frac{v_\alpha v_\beta}{v^2} \vec{=} \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} 4\pi$$

minus electron

$$\frac{\partial n}{m} 2 \int d\varepsilon \, \delta_{\alpha\beta} \quad \text{(Bonnelo - Landolt)}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{kT} f_0$$

$$f_0 = n C \, e^{\frac{\pi^2}{2mkT}}$$

Planck's radiation

4

$$= \sigma_{\alpha\beta} \frac{e^2}{m} \frac{1}{3} \tilde{\nu}(\varepsilon_F)\, d(\varepsilon_F)$$

9