Marko Žnidarič

VIŠJA STATISTIČNA FIZIKA

Zapiski predavanj

Univerza v Ljubljani
Fakultete za Matematiko in Fiziko
Oddelek za Fiziko
2011

VIŠJA STATISTIČNA FIZIKA, 3. stopnja, 2011/2012

Kazalo

Literatura:

R. K. Pathria in P. D. Beale, *Statistical Mechanics*, (Academic Press, 2011).
M. Le Bellac, F. Mortessagne in G. G. Bartrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, (Cambridge, 2010).
K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley& Sons, 1987).
N. Pottier, *Nonequilibrium Statistical Physics*, (Oxford, 2010).
M. Toda, R. Kubo in H. Saito, *Statistical Physics I*, (Springer, 1983).
R. Kubo, M. Toda in N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, (Springer, 1991).

VIŠJA STATISTIČNA 11/12

§ Zgodovina:

- statistična da mikroskopsko sliko termodinamike
- je nekakšna "coarse" teorija, ne odvisna od mikroskopskih zakonov (Einstein, ...)

Termodinamika: ~1800 Fenomenološki zakoni (Hooke, Fourier)

~1850 Boltzmann, Kelvin, Maxwell

Statistična ~1900 Gibbs: porazdelitve

Planckov zakon, fotoefekt: začetki kvantne mehanike

~ '40 Onsager: fazni prehodi...

~ '80 neravnovesna statistična

- Statistična izhaja iz postulatov; zanimivo je vprašanje zakaj statistično, kdaj ti velja? Teorija dinamičnih sistemov: znano za zelo preproste sisteme

§ Osnova - Entropija

$\boxed{\text{Osnovni postulat: vsa mikrostanja, kompatibilna z danim makrostanjem, so enako verjetna (ob času t najdemo sistem v nakjučnem mikro.).}}$

→ torej pri E = konst

→ E je "odlikovana" glede na druge ohranjene količine!!

Iz tega bomo izpeljali "vse"!

⇒ bomo izpeljali verjetnostne porazdelitve pri določenih vezeh (T=konst, H=konst, ...) v ravnovesju

⇒ pričakovane vrednosti v ravnovesju bodo povprečja čez porazdelitve.

⇒ če se makro spremenija, se bo tako, da bo šlo v makro, ki ima več mikrostanj!!
(entropijski zakon)

Slika odzadaj: sistem je sklopljen z okolico → hitri prehodi med mikrostanji → → naključni prehodi → vsa mikrostanja so enako verjetna

zaradi H

Označimo z $\Omega(E,N,V)$ # mikro. z danim $E, N, V, \ldots$

{V mislih imamo makro sistem. To, da bi resnici morali gledati interval $E \pm \Delta E$ mi vožimo za visoke dimenzije}

$$\boxed{S = k_B \ln \Omega}$$

(pokopališče Boltzmann) tema po dedku slovenka

brez k_B in Ω

desetletja v Dunaju; našla ga je hčerka (Avstrijska, ustvarjalna kriza, kritike naših, zdravje)

osnova za statistično

Ta enačba je vzeta, kot osnovni postulat:

Dajmo dva sistema v stik, in počakajmo na ravnovesje

termični stik

E_1	E_2

E_0

$$E_1 + E_2 = E_0$$

$$\Omega_0(E, \ldots) = \Omega_1(E_1, \ldots)\,\Omega_2(E - E_1, \ldots)$$

(princip največje verjetnosti) v rav. bo Ω_0 max. za $E = \bar{E}$, $E_1 = \bar{E}_1$, $E_2 = \bar{E}_2$

$$\left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial E_1}\right)_{eq} = \left(\frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1}\right)_{\bar{E}_1} \Omega_2(\bar{E}_2, \ldots) + \Omega_1(\bar{E}_1, \ldots)\left(-\frac{\partial \Omega_2}{\partial E_2}\right)_{\bar{E}_2} = 0$$

$$\frac{1}{\Omega_1}\frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1} = \frac{1}{\Omega_2}\frac{\partial \Omega_2}{\partial E_2}$$

$$\underbrace{\left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial E_1}\right)_{\bar{E}_1}}_{} = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2}\right)_{\bar{E}_2}$$

ta količina je enaka v obeh sistemih

$$\beta \equiv \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}$$

Iz termodinamike vemo, da je v termičnem ravnovesju $T_1 = T_2$ in, da

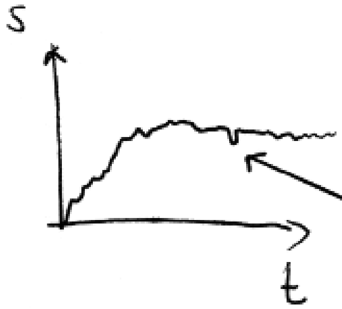
$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V} = \frac{1}{T}$$

Ti dve enačbi povezuje $\Rightarrow$ $S = k_B \ln \Omega$ je termodinamična entropija!

* tukaj ostani stran-t, vsk.

Entropijski zakon: v ravnovesju je S_{max} = Ω je max.

"S časom" se S povečuje. (Kvazistatično spremenjamo, da smo vedno v eq.)



velike fluktuacije. Malo verjetne v TD limiti ($N \to \infty$, $V \to \infty$); kdaj pa na koncu zamotna v "fluktuacijskem" izreku.

Reverzibilnost ~~→~~ naraščanje S ? ali je paradoks — NE

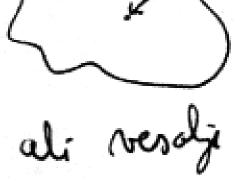
Velja na mikro nivoju, ker je $N \sim 10^{23}$ in ker so začetni pogoji z zelo malo S!

Npr.: Hiter →

V $\quad\quad$ 2V

$\Omega_{in} \sim V^N$ $\quad\quad$ $\Omega_{fin} \sim (2V)^N$

$$\Rightarrow \frac{\Omega_{fin}}{\Omega_{in}} \sim 2^N$$



fazni prostor

začetni pogoji ustreza zelo majhnemu delu, končni pa velikemu

stanja z manjšo entropijo so astronomsko neverjetna.

ali vesolje ob velikem poku.

* Enačba $S = k_B \ln \Omega(N,E,V)$ je treba jemati kot "fizik", z zrnom soli.

Npr. v sistemu N harmonskih oscilatorjev bi bila $\Omega = 0$, če E ni natančno enaka celemu večkratniku $\hbar\omega$! Termodinamsko si predstavljamo $S, E, \ldots$, kot gladke funkcije.

Rešitev je, da vzamemo za Ω število mikrostanj v nekem intervalu, npr. $[E, E+\Delta E]$.

Za velike N je to število neodvisno od ΔE !!

Zakaj: $\Omega \sim$ prostornina v faznem prostoru $\left(\frac{dx\,dp}{2\pi\hbar}\right)$

v d-dim prostoru: sfera, krogla

prostornina $V(d) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} R^d$

površina $S(d) = d \cdot \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} R^{d-1}$

jabolka iz samih olupkov, nič jedra

$V(d) = S(d) \cdot \frac{R}{d}$ $\Rightarrow$ v debelini "skoraj" $\frac{R}{d}$ je vsa prostornina!

Entropija kot mera za nered

* V teoriji verjetnosti oz. komunikacij merimo nered z informacijsko (~~Sta~~ Shannonova) entropijo: porazdelitev p_i, $\sum p_i = 1$

- $p_j = 1 \Rightarrow S = 0$
- $p_i = \frac{1}{\Omega} \Rightarrow$ S je max. in naraščajoča f. Ω
- aditivna: $p_1(q_1 \oplus 1) + p_2(1 \oplus q_2)$

$\Downarrow$

$S = p_1 S_1 + p_2 S_2$

za avto (rdeč, moder)

za kolo (rdeče, modro)

Shannon pokazal, da je enolično $S_{inf} = \sum_i - p_i \ln p_i$

* Za sistem pri $E=$konst. smo rekli, da so vsa mikrostanja enako verjetna $\Rightarrow$
$p_i = \frac{1}{\Omega} \Rightarrow S_{inf} = \ln \Omega \Rightarrow$ termodinamska S je kar do konstantnega faktorja enaka S_{inf} $\Rightarrow S = k_B \ln \Omega$ je nered

- TD S je kar "neurejenost" ustrezne verjetnostne porazdelitve v faznem prostoru
- v ravnovesju pri E je nered maksimalen

Zakaj so vsa mikro stanja enako verjetna ?

ali zakaj da fazno povprečje "pravilen" rezultat?

★ Ergodičnost: $\langle A \rangle = \int \rho A \, d\Gamma = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt$

fazno pp. ≡ časovno p.

~ a to ni vsa zgodba, ker ergodičnost nič ne govori o časovnih skalah

$T > T_{ergod}$?

★ Tipičnost: večina točk $\vec{x}$ v faznem prostoru je takih, da se bo $A(\vec{x})$ ujemala z $\langle A \rangle$! {velja za dovolj "gladke" A in visoko dim prostor}

imagine (S)(E) system + environment

- statistična: $\rho_{S+E} \sim \frac{1}{\Omega_{S+E}} \mathbb{1}$

  recimo mikrokanonična pri E

  $\rho_S = \mathrm{tr}_E \, \rho_{S+E}$

- tipičnost: za skoraj vse Ψ in $\rho_{S+E} \sim |\Psi\rangle\langle\Psi|$, je

  $\mathrm{tr}_E |\Psi\rangle\langle\Psi| \approx \rho_S$

Levyjeva lema: Za skoraj vse točke $\vec{x}$ na d-dim hipersferi velja, da je $A(\vec{x}) \approx \langle A \rangle$, za dovolj gladke A! ($|\nabla A| \leq 1$)

(elementarni rezultat)

$$\mathrm{prob}\left(|A(\vec{x}) - \langle A \rangle| \geq \varepsilon \right) < 4 \exp\left(-\frac{d+1}{9\pi^3} \varepsilon^2 \right)$$

(deviacije od "mikrokanoničnega" $\langle A \rangle$ so eksponentno majhne v d)

Levyeva lema je znana v matematiki (~~tudi kot "measure concentration"~~),
(formalizirana od '70)

(Milman & Schechtman, "Asymptotic theory of finite dimensional normed spaces")

v fiziki pa relativno novo (glej npr.: Hayden, Leung & Winter arXiv/0407049)

• ~~prepost posledica~~ tudi znana kot "measure concentration":

enakomerna mera na d-sferi je skoncentrirana na ekvatorju, (ne samo olupki, celo samo ekvator ostane od d-krompirja)

(miši iz d-prostora)

Ot., če je A odvisen od velikega števila x_i (pa ne premočno od ene same) potem je A efektivno neodvisna od $\vec{x}$!

• ~~[illegible]~~ iz Levya dobimo tudi centralni limitni izrek: vsota d spremenljivk $\Rightarrow$ $\sigma \sim \frac{1}{\sqrt{d}}$ in Gaussov $\sim e^{-d\varepsilon^2}$ rep.

Mikrokanonični ~~paradoks~~ ansambel:

Izračunali smo $S(E,V,N)$.

Podobno, kot smo gledali $E = E_1 + E_2$, lahko tudi N in V. Iz pogoja za ravnovesje dobimo

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} = \text{konst.} \equiv -\frac{\mu}{T} \qquad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N} = \text{konst.} \equiv \frac{p}{T}$$

oziroma

$$p = \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N}}{\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V}} = \text{po Maxwellovih relacijah} = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{N,S}$$

$$\mu = - \frac{\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V}}{\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V}} = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{V,S}$$

že od prej $\uparrow$ $\quad T = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{N,V}$

- Če tokj $S(E,N,V)$ obrnemo, da dobimo $E=E(S,N,V)$, lahko zapišemo

$$dE = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{N,V} dS + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} dN + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N} dV$$

$$dE = T\,dS + \mu\,dN - p\,dV$$

ali

$$dS = \frac{dE}{T} - \frac{\mu}{T} dN + \frac{p}{T} dV$$

energijski zakon
E je enolična f. + $\frac{\partial S}{\partial E} > 0 \equiv C_V > 0$
"principle of maximum entropy"
S je TD potencial, ki je pri $E,N,V=$konst. maksimalen v ravnovesju (ne-fiksirani parametri so v ravnovesju taki, da bo <u>S maksimalna</u>).

ali pri $S,N,V=$konst. je v eq. <u>E minimalna</u>.

<u>Legendrova transformacija:</u>

Vsi ti ekstremalni principi sledijo iz entropijskega

- Helmholtzova prosta energija

$$F \equiv E - TS = F(T,V,N,\dots)$$

$$dF = -S\,dT - p\,dV + \mu\,dN$$

pri $T,V,N=$konst. so ostali parametri taki, da je v eq. <u>F minimalna</u> $\quad (K_T > 0)$

- Gibbsova prosta energija:

$$G \equiv E - TS + pV = G(T, p, N, \ldots)$$

$$dG = -S\,dT + V\,dp + \mu\,dN$$

pri $T, p, N = \text{konst.}$ je v ravnovesju <u>G minimalen</u>

- Entalpija

$$H \equiv E + pV = H(S, p, N, \ldots)$$

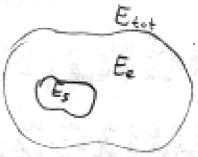
$$dH = T\,dS + V\,dp + \mu\,dN$$

pri $S, p, N = \text{konst.}$ je rav. <u>H ~~H~~ minimalna</u>

<u>Kanonični ansambel</u>

Z mikrokanoničnim je pogosto težko računati, ker je $E = \text{konst.}$ in imamo kombinatoričen problem, da dobimo $\Omega(E, N, V)$.

Boljše gledati ansambel pri fiksni T, ne E (bo povezano z F).



$E_{tot} = E_s + E_e$

vsa mikrostanja od E_{tot} (fiksen) so enako verjetna $\Rightarrow$

P_j = verjetnost, da je $E_s = E_j$ (ima mikrostanje S) $= \dfrac{\cancel{\Omega_s(E_j)}}{\cancel{\Omega_{tot}(E_{tot})}} = \dfrac{\Omega_e(E_{tot} - E_j)}{\Omega_{tot}(E_{tot})}$

$p_j(E_j)\,g(E)\,dE = \dfrac{\Omega_s(E_j)\,\Omega_e(E - E_j)\,dE}{\int \Omega_s(x)\,\Omega_e(E - x)\,dx}$ gostota stanj $g(E)$

[verjetnost, da imamo energijo E_j v S pa $\Omega_s(E_j)\,\Omega_e(E_{tot} - E_j) / \Omega_{tot}(E_{tot})$]

$S = k \ln \Omega \Rightarrow \Omega = e^{S/k}$: $\Omega_{tot}(E_{tot} = \bar{E}_s + E_{tot} - \bar{E}_s) = \exp\left(\frac{1}{k}\Big[\underbrace{S_s(\bar{E}_s) + S_e(E_{tot} - \bar{E}_s)}^{S \text{ je ekstenzivna}}\Big]\right) =$

on average $\Omega_s(\bar{E}_s)\,\Omega_e(E_{tot} - \bar{E}_s)$ {← velja sicer za poljuben $\bar{E}_s$}

$\cancel{= \exp\left(\frac{1}{k}\Big[S_s(\bar{E}) + \right.}$

$$\Omega_e(E_{tot} - E_j) = \exp\left(\frac{1}{k}\Big[S_e(E_{tot} - \bar{E}_s \overbrace{- E_j + \bar{E}_s}^{\text{malo, ker } E_s \ll E_e})\Big]\right) \simeq \exp\left(\frac{1}{k}\Big[S_e(E_{tot} - \bar{E}_s) + \frac{\bar{E}_s - E_j}{T}\Big]\right)$$

⇓ torej, za velik e velja

$$p_j = \frac{\exp\left(\frac{1}{k}\left[\frac{\bar{E}_s - E_j}{T}\right]\right)}{\exp\left(\frac{1}{k}\left[S_s(\bar{E}_s)\right]\right)} = \frac{e^{-\frac{E_j}{kT}}}{e^{-(\bar{E}_s - TS)/kT}}$$

$$Z \equiv e^{-(E-TS)/kT} = e^{-F/kT}$$ kanonična fazna vsota

(tradicionalno Z iz nemščine "Zustandsumme")

ali $$-\frac{F}{kT} = \ln Z(T,V,N)$$

Recept: izračunamo Z in imamo F, torej vse.

Z ni nič drugega, kot normalizacija, torej

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j} = \int g(E) e^{-\beta E} dE = Z(T,V,N)$$

gostota stanj

* Mikrokan. vs. kanonična

Velekanonična porazdelitev

Čisto analogno kanonični

$$p_j = \frac{e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}$$

$$Q(\beta,V,z) \quad Q \equiv \sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N(\beta,V,N) \quad , z \equiv e^{\beta\mu}$$

velekanonična fazna vsota

$d q \cancel{(z,\beta,V) = -E\,d\beta +}$

$$E = -\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta}\right)_{z,V} \qquad N = z\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial z}\right)_{\beta,V} \qquad p = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial V}\right)_{z,\beta}$$

velekanonični potencial $= \frac{pV}{kT} = \ln Q$ (primerjaj z $d(\ln Q)$ in dS)

Mikrokanonična – kanonična porazdelitev

- kanonična boljša za računat.

  izračunamo particijsko vsoto $Z \Rightarrow F \Rightarrow$ ostale funkcije stanja

  $\Downarrow$

  pričakovane vrednosti v ravnovesju

- informacija v "kanonični" je enaka kot v "mikrokanonični". Iz ene lahko dobimo drugo.

  + $$Z = \int_0^\infty g(E)\, e^{-\beta E}\, dE$$

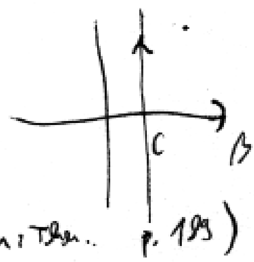
  + $$S = k \ln \Omega = k \ln g(E) + k \ln \Delta E$$
    $\Omega = \#$ stanj v $[E, E+\Delta E]$

    zanemarljivo ($k \ln \Delta E$) $\Omega = g(E)\,\Delta E$

    $$= k \ln g(E)$$

Med $g(E)$ in $Z(\beta)$ je Laplaceova transformacija

$$g(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathrm{Re}\beta - i\infty}^{\mathrm{Re}\beta + i\infty} d\beta\, e^{\beta E}\, Z(\beta)$$



(za primer glej: Greiner: Ther... p. 193)

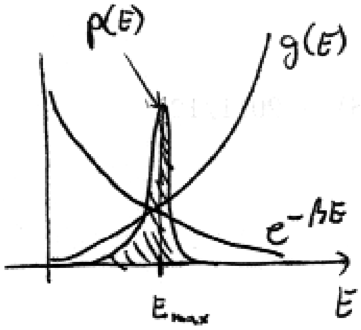
- v kanonični je verjetnost za mikrostanje j

$$p_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{Z},$$

da smo v katerem koli stanju z $E = E_j$, pa

$$p(E) = \frac{g(E)\, e^{-\beta E}}{Z}$$

ker $g(E)$ zelo hitro narašča z E, kot $g(E) \sim E^{a(N)}$, imam



za velike N je $p(E)$ zelo ostra, skoraj kot mikrokanonična!

Max. je pri $\frac{\partial p(E)}{\partial E} = 0 = \frac{1}{Z}\left(g' e^{-\beta E} - \beta g e^{-\beta E}\right)$

$$\Downarrow$$

$$g'(E_{max}) = \frac{1}{kT} g(E_{max})$$

$$\underbrace{\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial E}}_{} = \frac{1}{kT}$$

$$= \frac{\partial \ln g(E)}{\partial E} = \frac{1}{kT}$$ ← to pa natanko enako, kot iz entropije v mikrokan.

⇒ • najverjetnejša energija E_{max} je enaka kot energija v mikrokanoničnem "pri enaki T".

• E_{max} je tudi enaka kot povprečna $\langle E \rangle = \int g(E) E e^{-\beta E} dE =$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta)$$

?

$$\ln Z(\beta) = -\frac{F}{kT} = -\frac{1}{kT}(E - TS)$$

$$= E - TS + \beta \frac{\partial}{\partial \beta}(E - TS) = E - TS + TS = E$$

• razlika med mikro in kanon. je le v fluktuacijah, ki pa so majhne

$$\frac{\sigma_E}{E} \sim \frac{\sqrt{kT^2 C_V}}{E} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

<u>Primer</u>: kvantni H.O.: prehod iz kanon → mikrokan.

N kvantnih H.O.

en oscilator:

$$Z_1 = \sum_j e^{-\beta E_j} = \dots = \frac{e^{-\beta \hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

N oscil.: ker ne interagirajo en je $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{\otimes N}$ $\Rightarrow$

$$Z_N = Z_1^N = \left[\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right]^N$$

Iz tega $Z_N(\beta)$ lahko dobimo $g(E)$ z inverzno Laplaceovo, a v tem primeru dovolj razvoj:

$$\frac{1}{(1-x)^N} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{N-1+k}{k} x^k$$

$$Z_N = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{N-1+k}{k} e^{-\beta(k\hbar\omega + \frac{N}{2}\hbar\omega)} \equiv \sum_j g(E_j)\, e^{-\beta E_j}$$

k kvantov med N oscilatorjev

$$\Omega = g = \binom{N-1+k}{k}$$

št. načinov razdeliti k kvantov med N oscilatorjev

k kvantov

$$= \frac{(k+1)(k+2)\dots(k+N-1)}{(N-1)!}$$

N-1 pregrad, da imaš N kompartmentov ≡ H.O.

in ekvipart.

Virialni izrek:

Klasični $H(\vec{q},\vec{p})$. $\qquad \vec{x} = (\vec{q},\vec{p})$ dim $6N$

Kanonično povprečje $\qquad \left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \dfrac{\int x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} d\Gamma}{\int e^{-\beta H} d\Gamma}$

$$\int f g' dx = fg - \int f' g \, dx$$

$$\int x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} d\Gamma = -\frac{1}{\beta}\int x_i \frac{\partial}{\partial x_j}\left(e^{-\beta H}\right) d\Gamma \overset{pp.}{=} -\frac{1}{\beta}\left\{ \int x_i e^{-\beta H} d\Gamma_{\neq i} - \int \frac{\partial x_i}{\partial x_j} e^{-\beta H} d\Gamma \right\} =$$

$= 0$, če je na "robu" $H = \infty$, ali vsaj veliko večji, kot drugod

$$= \frac{1}{\beta}\delta_{ij}\int e^{-\beta H} d\Gamma$$

$\Downarrow$

$$\boxed{\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \delta_{ij} kT}$$

$x_i = q_i$: $\left\langle q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\rangle = -\langle q_i \dot{p}_i \rangle = kT$

$x_i = p_i$: $\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle = \langle p_i \dot{q}_i \rangle = kT$

Oz. $\left\langle \sum_j \vec{p}_j \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j} \right\rangle = 3NkT$

$$\left\langle \sum_j \vec{q}_j \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_j} \right\rangle = 3NkT$$

Poseben primer: $\quad H = \sum \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 \quad$ kvadratni

$$\sum_j \vec{p}_j \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j} + \vec{q}_j \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_j} = 2H$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle H \rangle = 3N \cdot \frac{1}{2} kT}$$

ekviparticijski izrek

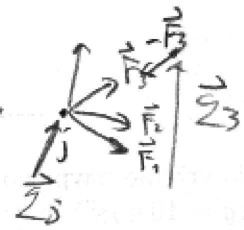
(kvantno pri $T \ll 1$ ne velja)

$$\langle \sum_j \vec{q}_j \underbrace{\dot{p}_j}_{} \rangle = -3NkT \qquad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

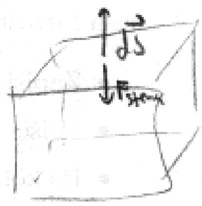
$$\underbrace{\qquad\qquad}_{\text{virial} = q_j F_j}$$

Plin:

$$H = T + \sum_{i<j}' U(\vec{q}_{ij}) + \sum_j' V_{stene}(\vec{q}_j)$$



$$\sum_j \vec{q}_j \cdot \vec{F}_j = \sum_j' \vec{q}_j \left\{ \sum_{i<j} \left(-\frac{\partial U}{\partial r}(\vec{q}_{ij}) \right) + \vec{F}_{stene\, j} \right\}$$



$$\langle -11- \rangle = \sum_{i<j} -\vec{q}_{ij} \cdot \frac{\partial U}{\partial r}(\vec{q}_{ij}) + \sum_j \vec{q}_j \cdot \vec{F}_{j\, stene}$$

$$\sum_j \vec{q}_j \cdot \vec{F}_{j\, stene} = -\oint p\, \vec{r} \cdot d\vec{S} = -p \int \operatorname{div} \vec{r}\, dV = -3pV$$

$$-3NkT = -3pV - \langle \sum_{i<j} \vec{q}_{ij} \frac{\partial U}{\partial r}(\vec{q}_{ij}) \rangle$$

$$pV = NkT - \sum_{i<j} \langle \vec{q}_{ij} \frac{\partial U}{\partial \vec{q}_{ij}}(\vec{q}_{ij}) \rangle \frac{1}{3}$$

virialni izrek

§Kvantna statistika — nerazločljivi delci

• Ker so nerazločljivi, morajo biti vse fiz. lastnosti neodvisne od "oštevilčenja"

$\Rightarrow$ $\forall$ opazljivka A , $[A, P]$

← permutacija

• eksperimentalno dejstvo:

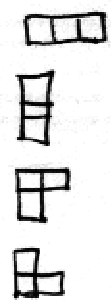
(spin-stat.: če je spin celo $\Rightarrow$ statist. bozon
če je polo $\Rightarrow$ 2 fermioni
nič ne pove, da $\exists$ samo ant. in bozo!)

+ v naravi realizirani le dve 1d ireducibilni reprezentaciji simetrične grupe S_n.

popolnoma sim. in antisim. (npr.: ni ostalih irep.)

+ ostale možne, ki so večdimenzionalne, imenujemo parastatistika, paradelci.

Npr. za $n=3$ S_3 ired.:



	dim
	1
	1
pseudo	2
	2

+ če bi imeli večdim. reprezentacijo bi bilo to zelo čudno:

~ rep. odvisna od n!

~ $P\Psi_1 = \Psi_2$, $\Psi_{1,2} \in$ irep.

~ sprememba baze ali. unit. evolucija iz Ψ_1 naredi kombinacijo drugih iz iste irep.
(še vedno pa ohranja irep.)

• Izrek o spinu in statistiki: · relativistična posta polja

· Lorentz invariant

· $d \geq 3$: spin $[S^i, S^j] = i\varepsilon^{ijk} S^k$

$S^2 |s,m\rangle = s(s+1)|s,m\rangle$
$m \leq s$ in $2s$ = celo
(Cohen-Tannoudji)

$\Downarrow$

$\exists$ le celi ali polci

za polcel spin je antikomutator 1 } fermioni $\Leftrightarrow$ popolnoma antisim.
celi spin je komutator 1 } bozoni $\Leftrightarrow$ popolnoma sim.

• v 2d NE VELJA $\Rightarrow$ anyoni

Drugačen, topološki pogled: • važna je topologija konfiguracijskega prostora!

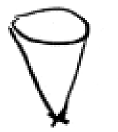
• npr. v 2d ni spina, ker ne moremo imeti diskretnih kvantnih števil. ⇒ tudi ni samo celega oz. polcelega spina

• Konfiguracijski prostor ~~enakih~~ nerazločljivih delcev: (2 delca)

v $d=2$ je $\mathbb{R}^2\times\mathbb{R}^2$.

- CMS je trivialno, ostane relativna lega, torej $\mathbb{R}^2$.
- točki $\vec{x}$ in $-\vec{x}$ sta ekvivalentni, ker gre samo za zamenjavo delcev. (Vse točke povezane z S_n so enake)
- izhodišče $\{0\}$ je treba izrezati (je singularna točka), ker ustreza 2 delcema na istem mestu.

(za bozone OK, ker za te tako vemo, da je faktor +1)



stožec, brez vrha

zanke, ki je 2x zamenjava, ne moremo zvezno v točko

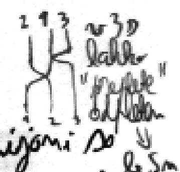
⇒ netrivialna faza ob zamenjavi

v 3d:

• $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$, brez CMS je $\mathbb{R}^3$.

tukaj, $\{0\}$, lahko vedno zdrsnemo v točko ⇒ ob zamenjavi ±1, torej ob zanki $(\pm 1)^2$

Summary: v $d\geq 3$ je grupa za kompozicijo teh obhodov S_n → dve irep.



v $d=2$ — " —

B_n = "braid group" ⇒ anyoni so spet 1d irep. od B_n (ki jih je neskončno, $e^{i\theta}$)

Iz faznega faktorja pri zamenjavi delcev sledijo komutacijske zveze kreacijskih &
anihilacijskih operatorjev:

zasedbena števila enolično določajo fizikalno stanje

bozoni: $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ za anijone pa

fermioni: $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$

<u>Kanonični ansambel</u>

$$Z = \mathrm{tr}\, e^{-\beta H}$$

<u>bozon:</u>

$$H = (\varepsilon-\mu)a^\dagger a$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n| e^{-\beta(\varepsilon-\mu)a^\dagger a} |n\rangle = \sum_{n} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)n} = \frac{1}{1-e^{\beta(\mu-\varepsilon)}}$$ ~~Bose-Einstein~~

zasedbeno število

$$\langle a^\dagger a = \hat{n}\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial(-\beta(\varepsilon-\mu))} = \frac{1}{[1-e^{\beta(\mu-\varepsilon)}]^2}\, e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\left(1-e^{\beta(\mu-\varepsilon)}\right) =$$

$$= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$ Bose-Einstein

(avtomatsko iz $[a,a^\dagger]=\mathbb{1}$, brez "neločljivosti")

<u>fermion</u>

$$H = (\varepsilon-\mu)c^\dagger c$$

$$Z = \sum_{n=0}^{1} \langle n| e^{-\beta(\varepsilon-\mu)c^\dagger c} |n\rangle = 1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$$

$$\langle \hat{n}\rangle = \frac{\partial}{\partial(\beta(\mu-\varepsilon))}\ln Z = \frac{1}{1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}\cdot e^{\beta(\mu-\varepsilon)} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$ Fermi-Dirac

Za neinteragirajoča delca je statistično obnašanje le preprosta uporaba F.-D. oz. B.-E., npr.
Fermijeva tekočina, fononi, sevanje črnega telesa...

Bolj zanimivi so fazni prehodi.

FAZNI PREHODI

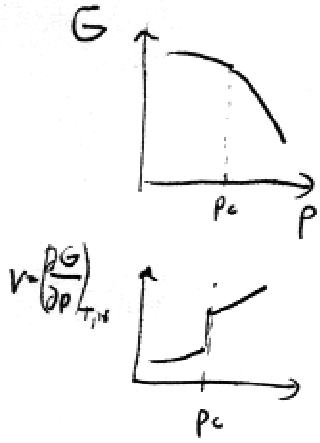
ob infinitez. spremembi se $\underbrace{\text{lastnosti}}$ sistema spremenijo nenadno.

(pričakovana vrednost (lokalne gostote))

Razlog so interakcije, ki v neki točki parametrov postanejo zelo pomembne - dominantne.

V točkah faznega prehoda opažujemo neanalitično obnašanje TD potenciala.

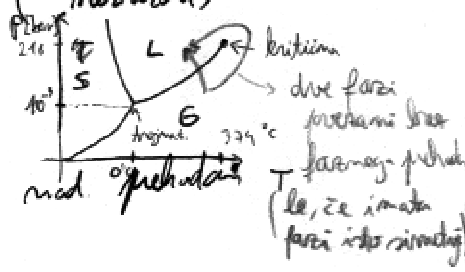
Npr: Gibbsov potencial
$G(T,p,N)$ (za vodo npr. spreminjamo T in p)

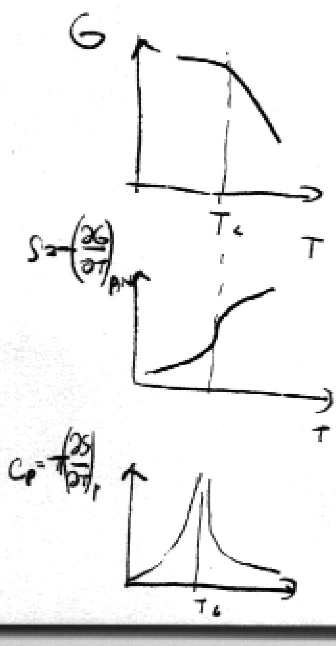


nezvezen 1. odvod $G \Rightarrow$ prehod 1. reda (= nezvezen)

npr: voda - led - para

ni neke povezave med simetrijo pred in med prehodom





- prehodi v superprevodnost ali supertekočnost
- tukaj je povezava med simetrijo pred in med prehodom, ker je prehod zvezen $\Rightarrow$ Landauova teorija
- v T_c dolge korelacije, čeprav je interakcija kratka $\Rightarrow$ univerzalnost

drugi odvod nezvezen $\Rightarrow$ prehod 2. reda

Lahko višji redi, a ponavadi govorimo le o 1. red in zveznih prehodih!

Zanimiva sta He^3 in He^4, ker so interakcije šibke, ostaneta tekoča do zelo nizkih temperatur ⇒ kvantna tekočina in kondenzacija

He^4: spin $s=0$ → bozon in "običajna" kondenzacija. Pod $T_c \sim 2K$ je supertekoč

He^3: spin $s=\frac{1}{2}$ ⇒ fermion in prehod v supertekočinost pri $3\cdot 10^{-3}K$ (p=1atm.) je zelo redek in drag.

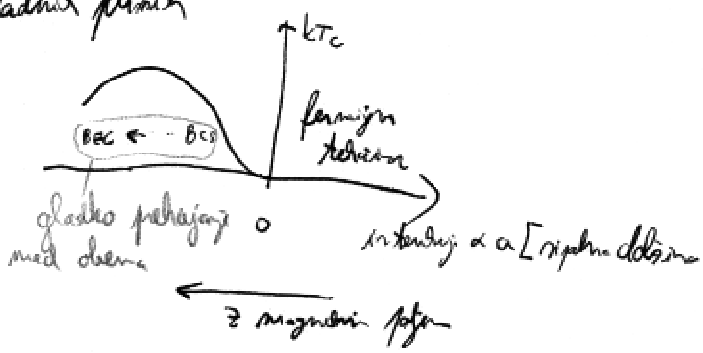
Kako lahko fermioni "kondenzirajo"?

- če je interakcija odbojna je fermijska tekočina stabilna, tudi pri $T\to 0$.
- če je interakcija privlačna, četudi je zelo majhna, pa postanejo fermioni nestabilni pri dovolj mali T.

⇓

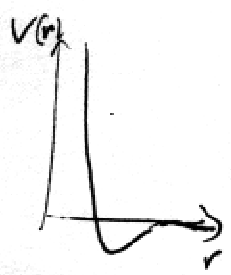
se parijo v bozonske delce
- $s=0$ pri BCS
- $s=1$ pri He^3

tudi v hladnih plinih



Kako dobimo neanalitično obnašanje: le v TD limiti!

Npr. delci s trdo sredico ⇒ v danem V le N_{max} delcev.



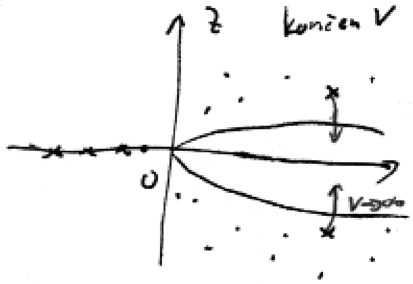
velekanonsko

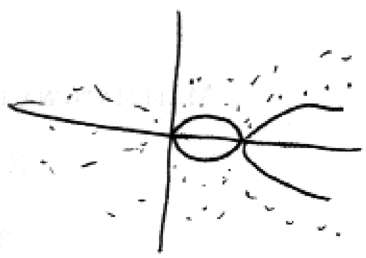
$$\Rightarrow Q(\beta,V,z)=\sum_j e^{-\beta(E_j-\mu N_j)} = \sum_{N=0}^{N_{max}} z^N Z_m(\beta,V,N)$$

↑ polinom ⇒ ~~analitičen f.~~
vsi koef. z so pozitivni ⇒ ničle niso realne

neanalitično obnašanje le v $N\to\infty$, $V\to\infty$ in $\frac{N}{V}$ = konst.

ničle Q





kompleksno konjugirane ali zero ničle

Ker so važne interakcije in $V\to\infty$ je matematična obravnava težka.

⇒ modelski sistemi, enostavna geometrija in dinamika, npr.: Ising

⇒ na srečo pa univerzalno obnašanje: kritični eksponenti
↳ zaradi dolgih korelacij, čeprav je interakcija kratka
↳ kolektivno: ena tipična področja, kjer posamezni sestavni delov

⇒ mi ne bomo obravnavali predvsem zvezni prehodi. ni dovolj — dinamika!

1D Isingov model

Isingu predlagal Lenz za PhD. Ideja je bila razložiti feromagnetizem.

⇒ ni prehoda, Ising napačno zaključil, da ga ni v 3D.

je zapustil fiziko, delal je v srednjih šolah. Šel iz Nemčije; gre v ZDA, kjer na koncu uči na univerzi. Le 2 članka ("Goethe hat fizik")

* Zapiski 1D Ising

* Zapiski za kvantne fazne prehode

(več v S. Sachdev, "Quantum phase transitions", CUP '98)

ali Physics Today, Feb. 11

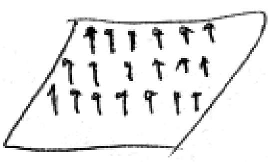
Topološke faze

Pri običajnih FP, ala Landau, imamo lokalni ureditveni parameter, po katerem se faze razlikujejo. Razlikujejo se po lokalni simetriji.

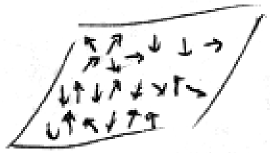
V '80-90 pa so opazili, da to ni vse – $\exists$ lahko faze, ki se razlikujejo le po globalnih opazljivkah = topološka faza

Dajmo vse demonstrirat na ravni čistih stanj, recimo pri $T=0$ so torej osnovna stanja

A.) Običajni prehodi (faze):
+ lokalna simetrija



faze se razlikujejo po lokalnih spremenljivkah, npr.: magnetizacija



simetrija H je spontano zlomljena in $|gs\rangle$ ima manj simetrije kot H.

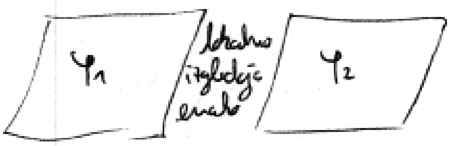
B.) Topološke faze:

+ degenerirano osnovno stanje, $|gs\rangle \in \{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_d\rangle\}$ (lahko tudi kak drug podprostor)
+ teh $|gs\rangle$ ne moremo ločiti z lokalnimi opazljivkami!

≡ TOPOLOŠKA FAZA

$$\langle \psi_i | A^{(loc)} | \psi_i \rangle = \langle \psi_j | A^{(loc)} | \psi_j \rangle \quad \text{za } \forall\, i,j, A^{(loc)}$$

(= pravilo velja asimptotsko, v TDL)



- na matematični ravni to pomeni, da je $A^{(loc)}$ na podprostoru $|gs\rangle$ kar $\propto \mathbb{1}$.
- $A^{(loc)}$ v H ne spremeni podprostora $|gs\rangle$ (ne odpravi degeneracije)

  ≡ TOPOLOŠKO ZAŠČITEN PODPROSTOR

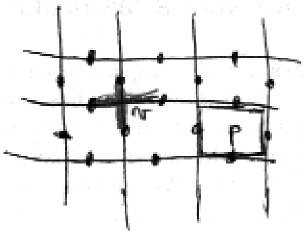
- $|\psi_j\rangle$ se med sabo razlikujejo le po globalnih opazljivkah

  ≡ NELOKALNI (TOPOLOŠKI) UREDITVENI PARAMETER

+ višja stanja so z "gap" Δ nad $|gs\rangle$. (pravilo) (imajo več simetrij, kot H)
  - tam se lokalno razlikujejo od $|gs\rangle$ → lokalne vzbuditve
+ globalna (topološka) simetrija

22.10.12

Primer: "toric code" (Kitaev '03)



2D spin-½ na sredinah stranic (+ PBC = torus) ← toric

$A_v = \prod_{i \in v} \sigma_i^x$ ← produkt 4-ih v vogljišču

$B_p = \prod_{j \in p} \sigma_j^z$ ← produkt 4-ih v plaketi

$$H = -J \sum_v A_v - J \sum_p B_p \quad , J > 0$$

→ lastne vrednosti pa so ±1

(vsi členi A_v, B_p med sabo komutirajo!!)

1) Za osnovno stanje velja Ψ, $A_v \Psi = \Psi$ $\forall p, v$

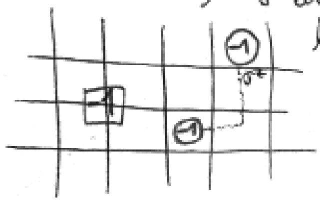
$B_p \Psi = \Psi$

degeneracija odvisna od r.p. ≡ topologije →
- je 4x degenerirano (na genusu g pa 4^g)
- majhen $h_{loc.}$ sicer odpravi degeneracijo, a eksponentno malo v L! za $H' = h \sum_\ell \sigma_\ell^z$ je $\Delta E \sim h^L$
- osnovna stanja se razlikujejo po nelokalnih $\prod_{c} \sigma^z$ in $\prod \sigma^x$ } za $\neq 0$ matrični element rabiš string $\sigma_1^z \ldots \sigma_L^z$ = en cikel } ki ga ni med dvema ired. zank

2) Za vzbujena pa ...(e) $A_v |\varphi\rangle = -|\varphi\rangle$

najenostavnejše ekscitacije so dobljene z "stringi" σ^x ali σ^z. Dajo dva kvazidelca na koncih.

↖ kvazidelec (anyon) na vertexu v (charge)



trije kvazidelci

$B_p |\varphi\rangle = -|\varphi\rangle$ (flux)

- charge ekscitacije so med sabo bozoni, enako fluks, medsebojna statistika pa je anyonska
- lokalni operatorji, npr. string σ^z ali σ^x, kreira opar ekscitacij na koncih stringa.
-

"Toric code" ⇓

Osnovno stanje:

+ lastno stanje vseh A_v, B_p z lastno vrednostjo +1.

+ na torusu 4x degenerirano: posledica $\prod_v A_v = \mathbb{1}$

$$\underbrace{\prod_p B_p = \mathbb{1}}$$

po vseh "p" ali "v".

niso vsi $2N^2$ A_v, B_p neodvisni,

2 vezi $\Rightarrow$ 4x deg.

{za dol. osnovnega le $2N^2-2$ pogojev, torej so 4 parametri prosti}

+ osnovno stanje lahko skonstruiramo npr. tako:

1) $|\Psi_0\rangle = |0\ldots0\rangle$ je lastno od vseh B_p, ni pa od A_v.

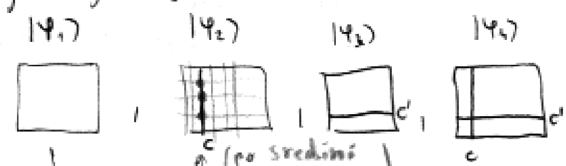
2) $|\Psi_1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(A_1+\mathbb{1})|\Psi_0\rangle$ je še vedno lastno B_p, in tudi A_1.

3) $|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_2+\mathbb{1})|\Psi_1\rangle$

⋮

$|\Psi_{N^2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{N^2}}}\left[\prod_v (A_v+\mathbb{1})\right]|0\ldots0\rangle$ = lastno od vseh A_v z $\lambda=+1$ $\Rightarrow$ je osnovno stanje

Lahko bi začeli tudi iz katerega drugega lastnega stanja B_p-jev! A bi dobili le 4 različna stanja: začetni $|\Psi_0\rangle$ je ali



~~robov~~ vsi 0 — $X_c \equiv \prod_c \sigma^x$ ena vrsta v "1" — (po sredini kvadratov) — $\prod_{c'} \sigma^x \equiv X_{c'}$

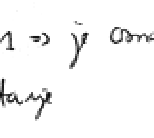
c, c' nereducibilne zanke (točno kakšni, ni važno)

• na genusu g pa 4^g (v ravnini le 1)

+ $|\Psi_{N^2}\rangle$ lahko vidimo tudi kot $\frac{1}{\sqrt{2^{N^2}}}\sum_{\substack{\text{vseh}\\ \text{kombinacij } v}}$ ( + …)

zanke obrnjenih spinov zaradi delovanja $A_v A_{v'}$…

+ če konstruiramo $X_c, X_{c'}, Z_{\tilde{c}} \equiv \prod_{\tilde{c}} \sigma^z$, $Z_{\tilde{c}'} \equiv \prod_{\tilde{c}'} \sigma^z$, potem velja



$[X_c, Z_{\tilde{c}'}] = 0$, $[X_c, X_{c'}] = 0$, $[Z_{\tilde{c}}, Z_{\tilde{c}'}] = 0$ in $(X_c Z_{\tilde{c}} + Z_{\tilde{c}} X_c) = 0$

algebra teh 4 operatorjev je natanko enaka, kot algebra Paulijevih matrik na 2 qubitih (kubitih)

19.10.13

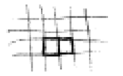
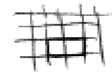
+ $X_{c,c'}, Z_{\tilde c,\tilde c'}$ so globalne simetrije H! (dve $\mathbb{Z}_2$ + unitarni globalni simetriji)
  (Z ima dve prekrivanji z A_v, in $\sigma^z\sigma^x\sigma^z = -\sigma^x \Rightarrow Z^\dagger H Z = H$)
+ osnovna stanja $\Psi_{1,2,3,4}$ se razlikujejo glede na delovanje globalnih $X, Z_{\tilde c,\tilde c'}$, npr.:

$$X_c|\Psi_2\rangle = |\Psi_1\rangle \quad \ldots\ldots$$

$$X_{c'}|\Psi_2\rangle = |\Psi_3\rangle$$

"Stabilizer group" $AB|\Psi_i\rangle = |\Psi_i\rangle$

+ osnovna stanja je lastno od vseh "loop"-ov iz A_v ali B_p. Še več, je lastno od $A\equiv\prod_{v\in V}A_v$ in od $B=\prod_{p\in P}B_p$, za poljuben od V in P!

  npr.:  = 

+ Če na $|\Psi_i\rangle$ delujemo s poljubnim lokalnim operatorjem, $\underbrace{\sigma_i^\alpha\sigma_j^\beta\ldots}_{\equiv A^{loc}}|\Psi_i\rangle$, omejena razdalja med i,j...

$$\langle\Psi_i|A^{loc}|\Psi_j\rangle = \nu\,\delta_{ij}+c_{ij}\,, \quad \text{v TDL } c_{ij}\to 0$$

potem velja ~~$A^{loc}|\Psi_i\rangle$~~! Na 4-dim prostoru osnovnih stanj so vsi $A^{loc}\propto \mathbb{1}$!

{ zaradi c,c' v def. $|\Psi_i\rangle$ lahko poljubno definiramo. Torej bo $[A^{loc},\{X,Z\}_{c,c'}]=0$, kar pomeni, ker so $\{X,Z\}_{c,c'}$ Paulijevi na $\mathcal{H}_{ground}$, da mora biti $A^{loc}\propto\mathbb{1}$, $P_{gs}A^{loc}P_{gs}=\nu\cdot\mathbb{1}$ }

+ Če imamo A^{loc} z fiksno lokalnostjo, potem je odprava degeneracije osnovnega, ko

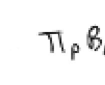
$$H\to H+A^{loc}, \text{ eksponentno mala v } N, \sim e^{-\alpha N}.$$

{ v prvem pert. redu je $\langle\Psi_i|A^{loc}|\Psi_j\rangle=\delta_{ij}$, in ne odpravi deg. Da bomo dobili netrivialni popravek, je treba taka potenca $(A^{loc})^r$, da dobimo c ali c' $\Rightarrow$ šele v redu $\langle A^{loc}\rangle^{O(N)}$ }

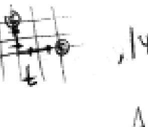
+ Korelacijske funkcije v $|gs\rangle$ padajo eksponentno z razdaljo. $|gs\rangle$ pa ima veliko prepletenosti ("area" law) $\Downarrow$ globalne (topološke) "korelacije"

Vzbujena stanja:

+ zaradi $\prod_v A_v=\mathbb{1}$ in $\prod_p B_p=\mathbb{1}$, lahko imamo le sodo število lastnih -1
  $\Rightarrow$ npr. dva A_v iz $+1\to-1$ $\Rightarrow$ sprememba = gap = $2\cdot 2=4J$

+ Z_t = string = $\prod_{j\in t}\sigma_j^z$  , $|\Psi_t\rangle = Z_t|\Psi_i\rangle$ ima dva "vzbujenji" ("charge delca")
  ↳ komutira z vsemi, razen z A_v na obeh koncih $\to$ energija $+4J$

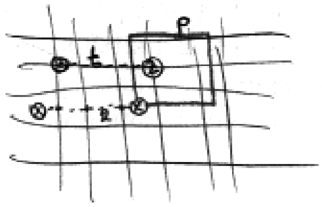
  $|\Psi_t\rangle$ odvisen le od lege defektov, ne pa poti "t".

X_t = string = $\prod_{j\in t}\sigma_j^x$,  $|\Psi_t'\rangle=X_t|\Psi_i\rangle$ je podobna zgodba — "fluks delca"

19.10.13

↓ vzbujena stanja

+ ob zamenjavi delcev:



t, q = string

p = loop

$$|\Psi_2\rangle = Z_t X_q |\Psi_i\rangle$$

↓ ⊗ zapeljemo okoli ⓩ

$$|\Psi_3\rangle = X_p |\Psi_2\rangle = \underbrace{X_p Z_t}_{\text{križata}} X_q |\Psi_i\rangle =$$

$$= -Z_t \underbrace{X_p}_{\text{loop}} X_q |\Psi_i\rangle = -Z_t X_q |\Psi_i\rangle$$

$$|\Psi_3\rangle = -|\Psi_2\rangle$$

dvakratna zamenjava delcev da faze $e^{i\pi}$ ⇒ ob zamenjavi faza $e^{i\pi/2}$

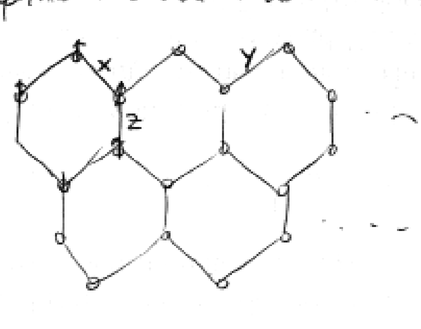
⊗ in ⓩ = anyonsko statistiko!

+ zamenjava ⊗ z ⊗ da +1 navadni delci (=bozoni)
 ali ⓩ z ⓩ da

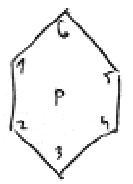
kompozit  = fermion

---

"Toric code" je morda nefizikalen zaradi 4-delčne interakcije, zato "Kitaev honeycomb model"



$$H = -J_x \sum_x \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_y \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_z \sigma_i^z \sigma_j^z$$



$W_p \equiv \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$, $[W_p, W_{p'}] = 0$, $[W_p, H] = 0$ in lastne vrednosti $W_p = \pm 1$.

+ $|gs\rangle$ je lastna od vseh W_p z $\lambda = +1$.

+ degeneracija $|gs\rangle$ je $2^{m/2}$, če je m # spinov.

+ se ne da egzaktno rešiti, a fizika podobna

1d Ising - rešitev:

$$H = -J\sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - b\sum_j \frac{1}{2}(\sigma_j^z + \sigma_{j+1}^z) \qquad + \text{P.B.C.}$$

$$h_{j,j+1} = -J\,\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - \frac{b}{2}(\sigma_j^z + \sigma_{j+1}^z) \qquad \sigma_j^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix} \text{ oz. klasična spremenljivka } z \pm 1$$

$$Z = \mathrm{tr}\, e^{-\beta H} = \mathrm{tr} \prod_j e^{-\beta h(\sigma_j^z, \sigma_{j+1}^z)}$$

$$K \equiv e^{-\beta h} = \begin{pmatrix} e^{-\beta h(1,1)}, & e^{-\beta h(1,-1)} \\ e^{-\beta h(-1,1)} & , e^{-\beta h(-1,-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+b)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-b)} \end{pmatrix}$$

$$Z = \mathrm{tr}\, K^N \qquad \text{prehodna matrika (transfer matrix)}$$

{ formalno $d=1$ dim klasični Ising $\rightarrow$ 0-dim kvantni model, če $K \equiv e^{-i\hat{H}}$; velja d-dim klasični $\rightarrow$ $(d-1)$ kvantni }

če sta λ_1, λ_2 lastni od K $\Rightarrow$ $Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N \simeq \lambda_{max}^N$

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J}\,\mathrm{ch}(\beta b) \pm \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J}\mathrm{sh}^2(\beta b)}$$

$$Z \simeq e^{\beta J N}\left[\mathrm{ch}(\beta b) + \sqrt{\mathrm{sh}^2(\beta b) + e^{-4\beta J}}\right]^N$$

$$F = -kT\ln Z \simeq -kTN\ln\lambda_{max} = -JN - NkT\ln\left[\mathrm{ch}(\beta b) + \sqrt{\mathrm{sh}^2(\beta b) + e^{-4\beta b}}\right]$$

Magnetizacija:

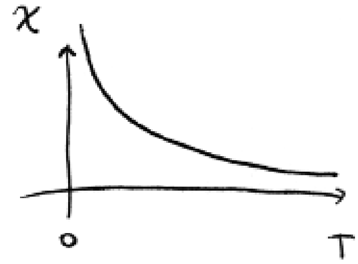
$$m = \sum_j \langle\sigma_j^z\rangle = -\left(\frac{\partial F}{\partial b}\right)_T = N\cdot\frac{\mathrm{sh}(\beta b)}{\sqrt{\mathrm{sh}^2(\beta b) + e^{-4\beta J}}}$$

$m(b=0, T) = 0 \Rightarrow$ ni faznega prehoda pri $T_c \neq 0$

5.3.12

Susceptibilnost:

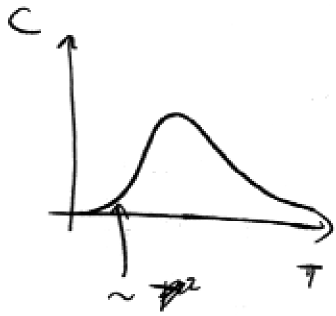
$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial b}\right)_{b\to 0} = N\beta \cdot e^{2J\beta}$$



prehod pri $T_c = 0$

potek notranje energije in toplotna kapaciteta

$$\sim N\frac{\beta^2}{ch^2(\beta J)}$$



Korelacijske funkcije: $(b=0)$

Za to potrebujemo $H = -\sum_j J_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$ + O.B.C (lažje)

$$Z = \sum_{\sigma_1^z} \cdots \sum_{\sigma_N^z} \prod_j e^{\beta J_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z} = \sum_{\sigma_1^z} \cdots \sum_{\sigma_{N-1}^z} \prod_{j=1}^{N-1} e^{\beta J_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z}\, 2ch(\beta J_{N-1})$$

rekurzija (vedno seštejemo zadnji spin)

$$Z = 2^N \prod_{j=1}^{N-1} ch(\beta J_j)$$

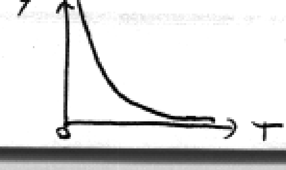
$$\langle \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \rangle = \frac{1}{Z}\left(\frac{1}{\beta}\frac{\partial Z}{\partial J_j}\right) = th(\beta J_j)$$

{ če bi delali z $b \neq 0$, bi lahko tudi $\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle = \frac{1}{\beta^2}\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial b_i \partial b_j}$ }

analogno

$$\langle \sigma_j^z \sigma_{j+r}^z \rangle = \frac{1}{Z}\frac{1}{\beta^r}\frac{\partial}{\partial J_j}\frac{\partial}{\partial J_{j+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{j+r-1}} Z = \prod_{l=j}^{j+r-1} th(\beta J_l) \equiv g(r)$$

Oz. $g(r) = th^r(\beta J) = e^{-r/\xi}$



$$\xi = \frac{1}{\ln cth(\beta J)}$$

Mimogrede, Z je dan z λ_{max}, ξ pa z $\frac{\lambda_{max}}{\lambda_2}$

$$\frac{1}{\xi} = \ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)$$

$$\lambda_1 = e^{\beta J} + e^{-\beta J}$$

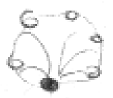
$$\lambda_2 = e^{\beta J} - e^{-\beta J}$$

- Ker je $\langle \sigma_j^z \rangle = 0$ so $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle = \langle \sigma^z \sigma^z \rangle_c$

- $$\sum_{r}{}' \langle \sigma_i^z \sigma_r^z \rangle_c = 1 + 2 \cdot \sum_{r=1}^{(N-1)/2} \mathrm{th}(\beta J)^r = 1 + \frac{2a}{1-a} = \frac{1+a}{1-a} = e^{2\beta J}$$

(neodvisno od "i")

$a = \mathrm{th}(\beta J)$



$$\Rightarrow \quad \chi = \beta \cdot \sum_{i,r} \langle \sigma_i^z \sigma_r^z \rangle_c$$ (fluktuacijsko-disipacijska zveza)

Perron-(Frobeniusov) izrek:

Matrika A, $(N\times N)$ z $A_{ij}>0$ za $\forall i,j$

$\Rightarrow$ • največja lastna vrednost je realna, nedegenerirana in pozitivna

$\lambda_{max}>0$, $|\lambda_j|<\lambda_{max}$, $\forall j$ ← splošno kompleksno

• pripadajoči lastni vektor ima vse komponente $x_i>0$.

{ dovolj je, da velja $A^m_{ij}>0$ za neko potenco m $\Rightarrow$ potem velja }
trditev za A ↑ „ireducibilna: iz vsakega i v vsak j"

Posledice: • V Isingu je prehodna matrika $T_{ij}>0$ $\Rightarrow$ λ_{max} je nedeg. $\Rightarrow$ analitična funkcija H in β $\Rightarrow$ ni faznega prehoda

(λ analitična iz perturbacijske t.) ker so vsi A_{ij} analitične f. od β { če bi lahko velja bila deg. $\Rightarrow$ fazni prehod }

• sistem enakih delcev (homogen) z hard-core interakcijo, ki je končnega dosega (lokalno) $\Rightarrow$ ni faznega prehoda v 1D (van Hove)

Fazni prehod v 1D?

Ising $H=\sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z$, $J_{ij}>0$, $J_{ij}\sim \frac{1}{|r_i-r_j|^\sigma}\sim\frac{1}{r^\sigma}=J(r)$

• če je $\sum_{r=1}^{\infty} rJ(r)$ končen $\Rightarrow$ ni faznega prehoda pri $T_c\neq 0$
oz. $T_c=0$

npr. $J=\frac{1}{r^\sigma}$ z $\sigma>2$ (Ruelle)

• če je $J\sim\frac{1}{r^\sigma}$ $1<\sigma<2$

$\Rightarrow$ fazni prehod pri končni $T_c\neq 0$ (Dyson)

za $1<\sigma<\frac{3}{2}$ so kritični eksp. enaki, kot za MFA. (J.L. Monroe '98)

{ Argument Peierlsa in Landaua za $F=E-TS$ o tem, da v 1d ni prehoda pri končni T, velja le za n.n. Isinga! }

4.3.12

Izrek Mermina in Wagnerja:

in interakcijo kratkega dosega

V sistemih z zvezno simetrijo v $d \leq 2$ ∄ ker to ni mogoče zlomiti pri $T_c \neq 0$. ⇒ ni faznega prehoda, ki bi zlomil to simetrijo (lahko pa je kak drug, ala K-T.)

Np.: Heisenberg izotropni

$$H = \sum_{i,j} J_{ij}\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \qquad \text{in} \qquad \sum_r r^2 J(r) < \infty$$

⇒ ni spontane magnetizacije pri $T_c \neq 0$

{ne velja pa za ~~izotropne~~ anizotropne}

- Za XXZ npr. pove, da ne more biti magnetizacija v XY ravnini.
- Za XXX pa v nobeni smeri

} v AF in FM

2D Ising - zgodovina:

- 1d Ising, da bi pojasnil feromagnete ('22, '25) $\Rightarrow$ narobe sklepal, da tudi v $d>1$ ni prehoda
- '28 Heisenberg in Dirac
- potem napad na 2D Ising: '30 leta Bragg, Williams, Bethe, Peierls
- dualnost (Kramers, Wannier '41): določijo T_c (prvi točni rezultat)
- Onsager na srečanju v N.Y. '42 do konca predavanja Wannierja oznani, da ima točno rešitev F (v $B=0$) in poda enačbo za kapaciteto $C \sim \ln|T-T_c|$
- '44 objavi
- '48 spet pride pred tablo (Cornell) in napiše enačbo za korelacije; tega spet ne objavi; zapiše tudi $\Pi(T) \sim (1-T_c)^{1/8}$

  (baje, ker so mu manjkali detajli v matematiki, pravijo pa odkril, da so matematiki to že poznali)
- '49 nato objavi z Bruno Kaufman: spinorska formulacija
- '52 Yang objavi podrobno izpeljavo

Onsager:

(Landau pripomni, da si ne predstavlja, da bi on to izpeljal)

- Johns Hopkins za 1 leta
- Brown: "sadistical" (podiplomci); brez PhD $\Rightarrow$ Nobelova (inevitabilnost)
- Yale: PhD, "Advanced Norwegian I in II."

4.3.12

2D Ising

V 2d pričakujemo prehod pri ~~končni~~ T_c: (à la Landau (Peierls))

* 1d: + osnovno stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow \ldots \uparrow\rangle$ (n.p. vsi $\uparrow$)

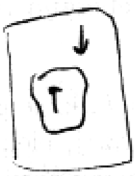
+ vzbujeno $|\uparrow\uparrow\downarrow \ldots \downarrow\uparrow\uparrow \ldots \uparrow\rangle$

2 "kinka" ⇒ energija $4J$ (nad osnovnim)

je pa kink kjerkoli od N mest

⇒ $F \sim 4J - kT \ln N^2$ ⇒ $\sim N \to \infty$ so kinki ugodnejši

⇒ neurejeno stanje pri $T > 0$

* 2d:  "otok" dolžine l

Energija: $2lJ$

entropija: $\sim N 3^{l-1}$ — 3 le groba ocena

↑ začetek otoka; → v vsaki točki meje nadaljuje v 3 možnih smereh

$$F \sim 2Jl - kT(\ln N + l \ln 3) = l(2J - kT\ln 3) - kT \ln N$$

⇒ bo ~~prehod za~~ neurejeno za $l < \frac{kT \ln N}{2J - kT\ln 3}$ oz. bodo "otoki" končnih dimenzij

~~⇒ za $2J > kT\ln 3$~~ večji otoki pa malo verjetni

za $2J \geq k \ln 3\, T_c$ bo prehod.

{če je $2J - kT\ln 3 < 0$ so vedno otoki verjetni
$2J - kT\ln 3 > 0$ pa le otoki $l \sim \ln N$ ⇒ urejena faza}

$$kT_c \sim \frac{2J}{\ln 3} \approx 1.82J$$ (točna je $2.27J$)

2D Ising - dualnost (Kramers & Wannier '41)

$$H = -J\sum_{n.n.} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

$$Z = \sum_{\sigma_j^z} \prod_{n.n.} \underbrace{e^{\beta J \sigma_i^z \sigma_j^z}}_{\mathrm{ch}K\,(1+\sigma_i^z\sigma_j^z\,\mathrm{th}K)}$$

$$\boxed{K \equiv \beta \cdot J}$$

Visoke T: (ideja)

$K \ll 1 \Rightarrow \mathrm{th}K \ll 1$

razvoj po potencah $\mathrm{th}K$

število povezav $= n$

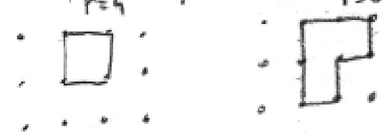
$$Z = (\mathrm{ch}K)^n \sum_{\sigma_j^z} \Big[1 + \mathrm{th}K \sum_{n.n.} \sigma_i^z\sigma_j^z + (\mathrm{th}K)^2 \sum \underbrace{\sigma_i^z\sigma_j^z\sigma_k^z\sigma_l^z}_{\text{ustrezna vsota } = 2^N \cdot m(r=2)} + \dots \Big] =$$

$$= (\mathrm{ch}K)^n 2^N \sum_{r=0}^{\infty} m(r) (\mathrm{th}K)^r$$

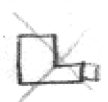
velja za poljubno mrežo; 1d, 2d, heksagonalno, ...

"zaključenih grafov" ≡ v r-tem redu iz r prečk, vsaka točka pa sodo povezana (prečk)

r=4 r=8



disjunktni grafi so OK, a ne po skupni stranici, npr.

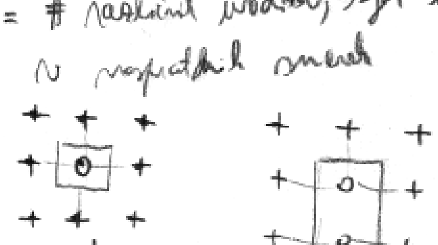


Nizke T (ideja)

- osnovno stanje $E_0 = -Jn$
- vsaka sosednja spina z različno smerjo prispeva $2J$

$$Z = \sum_{E_j} e^{-\beta E_j} = e^{Kn} \sum_r m(r) e^{-2Kr}$$

$m(r) =$ # različnih vzorcev, kjer imamo r sosednjih v nasprotnih smereh



$r=4$ $r=6$

$m(r) =$ # zaključenih grafov na dualni mreži (recipročni Bravaisovi)

$\Rightarrow$ označimo z * podatke za dualno mrežo $\begin{pmatrix} \text{kvadratna} - \text{kvadratna} \\ \text{trikotna} - \text{šestkotna} \\ \vdots \end{pmatrix}$

$$m(r) = m^*(r)$$
$$n(r) = n^*(r)$$

[definirajmo $\quad \mathrm{th}\, K^* = e^{-2K}$ $\quad$ oz. $\mathrm{sh}\, 2K\, \mathrm{sh}\, 2K^* = 1$ $\quad \left(K^* \equiv J\beta^* = \frac{J}{kT^*}\right)$

nizko-T razvoj je torej: $\quad Z = e^{Kn} \sum_r m^*(r) \left(\mathrm{th}\, K^*\right)^r$

visoko-T* za dualno mrežo je: $\quad Z^* = 2^{N^*} \left(\mathrm{ch}\, K^*\right)^M \sum_r m^*(r) \left(\mathrm{th}\, K^*\right)^r$

torej

Dualnost: $\quad \underline{Z(N,T) = 2^{-N^*} \left(\mathrm{sh}\, K^*\, \mathrm{ch}\, K^*\right)^{-M/2} Z^*(N^*, T^*)}$

opazka: velika K ustreza mali K^* in obratno

$\Rightarrow$ nizka T na mreži $\equiv$ visoka T na duali in obratno

Za kvadratno, ki je dualna sama sebi $\Rightarrow$

$$Z(N,T) = \left(\mathrm{sh}\, 2K^*\right)^{-N} Z(N, T^*)$$

$\Rightarrow$ če je singularnost pri T_c, je tudi pri T_c^*

$\Rightarrow$ če je singularnost le ena (je, Yang & Lee '52) $\Rightarrow$

$$T_c = T_c^*$$
$$\Downarrow$$
$$\mathrm{sh}\, 2K_c = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{J}{kT_c} = \frac{1}{2}\, \mathrm{sh}^{-1}(1) = \frac{1}{2} \ln(1+\sqrt{2})$$

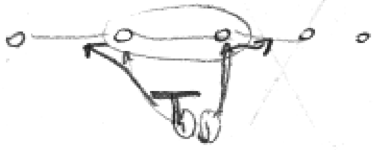
oz. $\quad \frac{kT_c}{J} \approx 2.27$

Točna rešitev 2D Isinga na kvadratni mreži : $(B=0)$

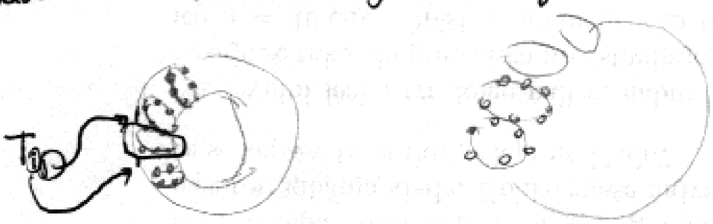
- le shematsko, da bo jasna ideja in zakaj je rešljiv, z $B\neq 0$ pa ne
- ni Onsagerjev način, ampak enostavnejši (Plischke & Bergersen "Eq. stat. phys.")

(alternativa so izpeljave z grafi (det. antisim. matrik), glej L. Reichl, "A modern course in stat. phys.")

v 1d smo rešili s "transfer" matriko



tudi v 2D enaka ideja (Onsager)



PBC $\Rightarrow$ torus

matrika T je dimenzije $2^N \times 2^N$, če je $N\times N$ spinov!

$$Z \sim \mathrm{tr}\Big(\underbrace{V_2^{1/2}\, V_1\, V_2^{1/2}}_{\sim T}\Big)^N$$

$K \equiv \beta J$

simetrična forma

izkaže se, da je $\quad V_1 = e^{K\sum_j \sigma^z_{j,R}\,\sigma^z_{j+1,R}}$ $\quad$ {znotraj ene verige}

$(\mu_1,\dots,\mu_N)\in\{-1,1\}$

indeks v verigi $\quad$ ne vsebuje

{med verigami} $\quad \langle \vec{\mu}\,|\,V_2\,|\,\vec{\mu}\,'\rangle = e^{K(N-2m)}$, če je m indeksov pri različnih v $\vec{\mu}$ in $\vec{\mu}\,'$

npr.: $\langle 1|e^{\beta J\sigma^z_1\sigma^z_2}|1\rangle = e^{K}$ $\quad \langle 1|\ |-1\rangle = e^{-K}$ $\quad \langle -1|\ |-1\rangle = e^{K}$

$$V_2 = (2\,\mathrm{sh}\,2K)^{N/2}\, e^{K^*\sum_{j=1}^{N}\sigma^x_j} \qquad \mathrm{th}\,K^* = e^{-2K}$$

$$\left\{\; V_2 = \prod\left(e^{K}\,\mathbb{1} + e^{-K}\sigma^x\right) = \prod e^{K^*\sigma^x} A(K)\right\}$$

$$V = V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2} = (2\,\mathrm{sh}\,2K)^{N/2}\, e^{\frac{K^*}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x}\, e^{K\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z}\, e^{\frac{K^*}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x}$$

{ kakor "kicked" T1 model ⇒ rešljiv }

J.-W. transformacija na fermionske operatorje

$$\sigma_j^+ = e^{i\pi\sum_{l=1}^{j-1} c_l^+ c_l}\, c_j^+$$

$$V_2 \sim e^{2K^*\sum_j (c_j^+ c_j - \frac{1}{2})} \qquad \text{(diagonalen)}$$

$$V_1 \sim e^{K\sum_j (c_j^+ - c_j)(c_{j+1}^+ + c_{j+1})} \qquad \text{(ga diagonalizira Fourier)}$$

Fourier

$$V_1 = \prod_q V_{1q}$$

$$V_2 = \prod_q V_{2q}$$

paramezni Fourierovi ~~na~~ načini

vsaka $V_{1,2,q}$ je le še 4x4 matrika

lastne vrednosti V so produkt lastnih vrednosti <u>4x4 matrik za</u> paramezne q!

$\beta F = -\ln Z \Rightarrow$ = vsak lastnih vrednosti

- tehnični detajl: sodo in liho število fermionov različni dovoljeni q.

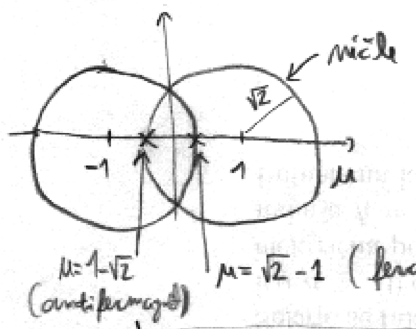
v limiti $N \to \infty$ in za $K = K^*$ sta največji lastni degenerirani ⇒ fazni prehod.

$$\bullet \quad \frac{\beta F}{N^2} = -\frac{1}{2}\ln(2\,\mathrm{sh}2K) - \frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dq\, \mathcal{E}(q)$$

enodelčne energije "J1" modela

$$= -\ln(2\,\mathrm{sh}2K) - \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2} d\varphi \ln \frac{1+\sqrt{1-g^2\sin^2\varphi}}{2}$$

ničle Z v kompleksni β, oz. $u = \mathrm{th}K$

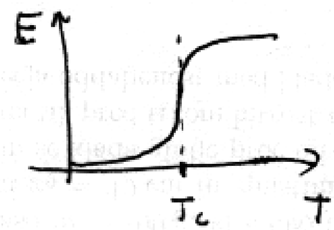


$$g = \frac{2\,\mathrm{sh}2K}{\mathrm{ch}^2 2K}$$

$\{ g = 1$ pri $\mathrm{sh}2K = 1$ oz. na prehodu $\}$

• notranja energija!
$$E = \frac{\partial F}{\partial(\beta)}$$

z eliptičnimi integrali

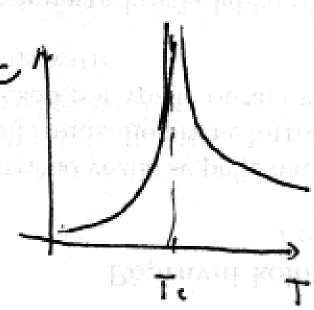


zvezna ⇒ ni latentne
⇒ zvezni prehod

• toplotna kapaciteta:

$$c = \frac{1}{N^2}\frac{\partial E}{\partial T} = \dots \text{ z eliptičnimi}$$

v bližini T_c: $\approx k_B\left(-\frac{8}{\pi}\right)(\beta J)^2 \ln\left|1-\frac{T}{T_c}\right| + \text{konst.}$

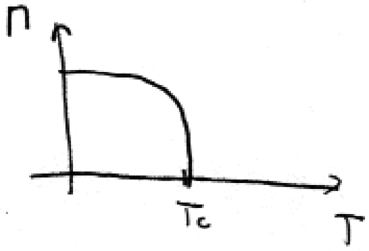


$$c \sim \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\alpha} \Rightarrow \text{kritični eksponent } \alpha = 0$$

$$\left\{ \ln x = -\lim_{\alpha\to 0}\frac{x^{-\alpha}-1}{\alpha} \right\}$$

• magnetizacija = urejenostni parameter (Onsager ugotovil, ~~Yang~~ dokaz) Yang '52

$$\frac{M}{N^2} = \begin{cases} \left[1 - \frac{(1-\mathrm{th}^2K)^4}{16\,\mathrm{th}^4K}\right]^{1/8} & ; T<T_c \\ 0 & ; \text{sicer} \end{cases}$$



$$\approx \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{\beta} \quad \text{za } T<T_c \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{1}{8}$$

• susceptibilnost:

$$\chi = \frac{1}{N^2}\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_{B=0} \sim |T-T_c|^{-7/4} \quad ; \gamma = \frac{7}{4}$$

• korelacijska dolžina:

$$g(r) = \langle \sigma_i^z \sigma_{i+r}^z \rangle_c \simeq e^{-r/\xi}$$

$$\xi \sim \left|1-\frac{T}{T_c}\right|^{-1} \quad \text{na obeh straneh } T_c$$

$$\Rightarrow \nu = 1$$

za $T=T_c$ $\quad g(r) \approx \frac{1}{r^{1/4}} \quad \Rightarrow \quad \eta = \frac{1}{4}$

$\delta = 15$

2d Ising v $B\neq 0$ ni rešljiv, ker bi imeli v V_1 še $e^{\beta B\sum \sigma_j^z}$ člen, torej "tilted Ising", ki pa ni rešljiv (J.-W. ~~da kvadratne člene~~ ne da kvadratnega v C^+)

Kritični eksponenti

Iz 2d Isinga smo videli, da količine algebrajsko divergirajo v T_c.
{logično, to je samo red pola}

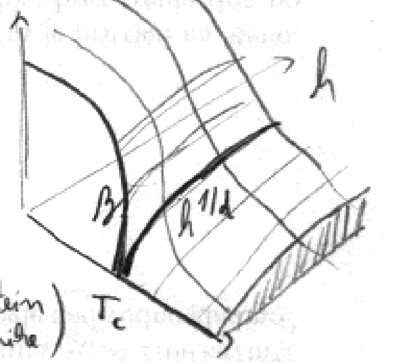
- ureditvene parametre: + za magnetne sisteme Π
  + za prehod plin-tekočina pa npr: $|\rho_P - \rho_C|$

in konjugirana spremenljivka, ki, če je $\neq 0$, povzroči neničelen ureditveni parameter
($h = \mu - \mu_c$ za plin-tek.)

$$\Pi \sim (T-T_c)^{\beta}$$ {$T<T_c$ in $h \to 0$}

$$\chi \sim \left(\frac{\partial \Pi}{\partial h}\right)_{h\to 0} \sim |T-T_c|^{-\gamma}$$ {lahko različna γ na obeh straneh, a so enaki}

$$\Pi \sim h^{1/\delta}$$ {$T=T_c$}



$$C_v \sim |T-T_c|^{-\alpha}$$ {lahko na obeh straneh, a so enaki}

korelacijska $$g(r) = \langle \Pi_i \Pi_{i+r} \rangle_c \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi}$$ (Ornstein Zernike)

{η je za obnašanje pri T_c}

$$\xi \sim |T-T_c|^{-\nu}$$

- kritični eksponenti niso odvisni od podrobnosti sistema, temveč le od:
  + ~~...~~ dosega interakcije: kratek vs. dolg
  + dimenzije d
  + dimenzionalnosti ureditvenega parametra n
  (# komponent enotskega vektorja)

He^4 : $n=2$

$n=1 \equiv$ Ising (diskreten) $n \geq 2$ zvezna simetrija ("Heisenberg" $n=3$)

 12.3.12

• za $d>4$ so neodvisni od d in n in enaki MFT.

	MFT	2d Ising	num. 3d Ising ($n=1$)	num. 3d Heis ($n=3$)	sferični model (Pathria) $d=3$, $n=\infty$
α	0	0 (ln)	0.12	-0.1	-1
β	1/2	1/8	0.32	0.36	1/2
γ	1	7/4	1.24	1.40	2
δ	3	15	4.90	4.82	5
ν	1/2	1	0.63	0.70	1
η	0	1/4	0.03	0.03	0

• vsi eksponenti niso neodvisni: zveze med njimi parimo skalirni zakoni.
+ npr.: χ je $\neq \gamma$, in pa korelacijami

$$\Rightarrow \quad \gamma = \nu(2-\eta)$$

podobno $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$

$$\gamma = \beta(\delta - 1)$$

$$\nu d = 2 - \alpha$$

{za $d\geq 4$ imamo MFA, torej v tej enačbi $d=4$}

le 2 neodvisna eksponenta !!

Landau-Ginzburg (φ^2,φ^4)
sferični ($\Sigma \sigma_i^2 = N$)

{RG rešitev modelov: modelov pokaže, da je MFA za $d\geq 4$ točna}

Zakaj? • ξ divergira $\Rightarrow$ edina relevantna skala (renormalizacija, interakcije kratkega dosega ni važna) (kritični, T_c pa ne)

$\Uparrow$

to imenujemo "skalirna hipoteza"

poglejmo enote in skaliranje (L v $T=T_c$) operatorjev

		div. (po t)	zveza
energija	$\frac{F}{kT}\frac{1}{V} = \left[\frac{1}{L^d}\right]$	$t^{-\alpha+2}$ ($F'' \sim t^{-\alpha}$)	$\Rightarrow 2-\alpha = \nu d$
korelacijska	$g(r) = \left[\frac{1}{L^{d-2+\eta}}\right]\star$ {vstavek kako divergira}	t	/
	$\frac{M}{V} = \sqrt{g} = \left[\frac{1}{L^{(d-2+\eta)/2}}\right]$	$t^{+\beta}$	$\Rightarrow \nu(2-\eta-d) = 2\beta$
	$kT\chi$ = F.-D. relacija $= \int g(r)\,dV = \left[\frac{1}{L^{\eta-2}}\right]$	$t^{-\gamma}$	$\Rightarrow \nu(2-\eta) = \gamma$
	$\frac{h}{kT} = \frac{F/kTV}{M/V} = \left[L^{(2+d-\eta)/2}\right]$ {$M \sim \frac{\partial F}{\partial h}$}	$t^{\beta\delta}$ ($M^\delta \sim h$, $t^{\beta\delta} \sim h$)	$\Rightarrow \nu(2+d-\eta) = 2\beta\delta$

assumption: $L \sim \xi \sim |T-T_c|^{-\nu} \star$ (t)

iz dveh eksponentov $\star$, dobimo ostale!

LE SINGULARNI DEL

skalirna hipoteza $\equiv$ prosta energija ni f. T, h posebej, temveč (v okolici T_c!)

F = homogena $\Rightarrow F(\lambda^p t, \lambda^q h) = \lambda F(t,h)$

$$F(t,h) \sim |t|^{2-\alpha} f\left(\frac{h}{|t|^{\beta+\gamma}}\right)$$

(Kadanoff

$\Downarrow$ le ena univerzalna funkcija f. {zakaj je tako, bo "razložila" renormalizacija}

<u>Približek povprečnega polja</u> (ПFA ; pribl. molekularnega polja ; Weiss, Bragg-Williams, Bethe, ...)

$$H = -J\sum_{n.n.} \sigma_i^z \sigma_j^z - h\sum_i \sigma_i^z$$

"večdelčni" problem; kaj pa, če nadomestim vpliv okolice na neko mesto z <u>pričakovano vrednostjo</u>.

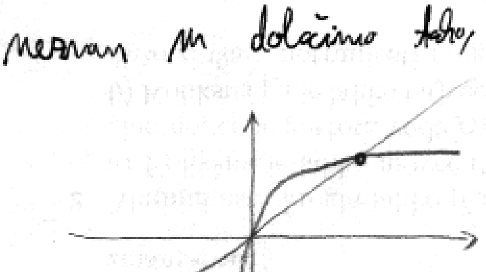
$$\langle \sigma_i^z \rangle \equiv m \quad , \; q \equiv \text{koordinacijsko število}$$

$$\cancel{H_{\Pi FA} = -J\sigma_i^z \sum_{n.n.}} \qquad H = -\sum_i \sigma_i^z \Big(\sum_{n.n.} J\sigma_j^z + h\Big) =$$

$$= -\sum_i \sigma_i^z \Big\{ (q \cdot J m + h) + J\underbrace{\sum_{\substack{n.n.\\ j}} (\sigma_j^z - m)}_{\text{fluktuacije, v povprečju 0 in zanemarimo}} \Big\}$$

$$H_{\Pi FA} = -\sum_i \sigma_i^z (qJm + h) \qquad : \text{enodelčni problem!}$$

neznan m določimo tako, da bo $\quad m = \langle \sigma_i^z \rangle_{\Pi FA} = \dfrac{\mathrm{tr}\left(\sigma^z e^{+\beta(qJm+h)\sigma^z}\right)}{\mathrm{tr}\, e^{+\beta(Jmq+h)\sigma^z}} =$



$$\boxed{m = \mathrm{th}\left(\beta[qJm + h]\right)}$$

rešitev $m=0$ (vedno) in $\pm m_0$ za $\beta q J \geq 1$

$\Downarrow$

kritična temperatura $\dfrac{kT_c}{J} = q$

$\star$ v ПFA ni močne odvisnosti od d!

razvoj po $(\beta q J)$ za! (za $h=0$) $\qquad m_0 = \beta q J m_0 - \frac{1}{3}(\beta J q)^3 m_0^3 + \dots \qquad \underbrace{(1-\beta q J)}_{(T_c - T)} = \frac{1}{3}(\beta J q)^3 m_0^2$

$$m_0 \sim (T_c - T)^{1/2} \quad \text{za } T < T_c \;\Rightarrow\; \beta = \frac{1}{2}$$

• $\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{T,h=0} = \frac{\beta}{ch^2(\beta z J m) - \beta z J} \sim \frac{1}{T-T_c} \Rightarrow \gamma = 1$

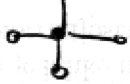
BTW: χ divergira pri T_c, a korelacijske ($\to\leftarrow$ z F.-D. izrekom)

• $E_{h=0} = -\frac{N}{2} J z m^2$, $c = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{h=0} = \begin{cases} \frac{3}{2} N k_B & ; T<T_c \\ 0 & ; T>T_c \end{cases}$

c ni zvezen $\Rightarrow \alpha = 0$

• razvoj pri $T = T_c = \frac{Jz}{k_B}$ $\{\beta z J = 1\}$

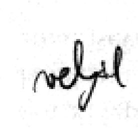
$$m = m + \beta h - \frac{1}{3}(m+\beta h)^3 \to \cancel{\beta z J m}$$
$$\Downarrow$$
$$h \sim m^3 \Rightarrow \delta = 3$$

Lahko tudi izboljšamo, da vzamemo v poštev tudi korelacije v bližini σ_i^z. Npr. Bethejev približek (( eksaktno, ostali v MFA ... NALOGA).

Vendar tudi v teh izboljšavah enaki kritični eksponenti.

★ MFA bo veljal le, če bodo korelacije zanemarljive. Pričakujemo, da je slab v 1d in najbrž v 2, boljši pa za velike d. gostota proste energije

flukt. zanemarljive, če bo $f_{FLUKT} \ll f$



Ginzburgov kriterij

$$\frac{kT}{\xi^d} \ll kT\, t^{2-\alpha}$$

$$t^{\nu d} \ll t^{2-\alpha} \Rightarrow \quad d > \frac{2-\alpha}{\nu} = 4$$

v MFA lahko dobimo tudi ν in η {od $g(r)$}, čeprav se zdi, da v MFA nimamo korelacij. "Trik": korelacij glede na H (ne H_{MFA}), a z MFA rešitvijo.

v k-prostoru $$g(k) = \int d^d r \, g(r) e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\text{za } g(r) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \Rightarrow g(k) \sim \begin{cases} \sim \frac{1}{k^{2-\eta}} & ; T = T_c \\ \sim \xi^{2-\eta} & ; T \neq T_c \text{ in } k \to 0 \end{cases}$$

$$\xi^{2-\eta} \leftarrow \frac{\xi^d}{\xi^{d-2+\eta}}$$

η in ν dobimo torej iz skaliranja $g(k \to 0)$.

- Če imamo $H = -J\sum \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum h_i \sigma_i^z$

$$m_i = \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{\mathrm{tr}(\sigma_i^z e^{-\beta H})}{\mathrm{tr}\, e^{-\beta H}}$$

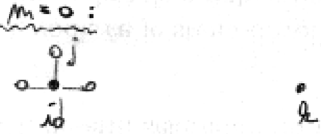
$$\frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \beta \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle_c$$

MFA enačbe so (bolj podrobno glej Bellac, str. 196)

$$m_i = \mathrm{th}\Big(\beta\big[J \sum_{j,\,n.n.} m_j + h_i\big]\Big)$$

$$\frac{\partial}{\partial h_k} \Rightarrow \sum_j \left(\frac{\delta_{ij}}{1-m^2} - \beta J_{ij}\right)\langle jk \rangle_c = \delta_{ik}$$

nad prehodom $m=0$:



$$\langle ik \rangle_c - \beta J \sum_{j,\,n.n.} \langle jk \rangle_c = \delta_{ik}$$

in dalje razvoj (kvadratna mreža za def.): $$\langle ik \rangle_c - 4\beta J \langle ik \rangle_c - \beta J \underbrace{\Big(\sum_{j,\,n.n.} \langle jk \rangle_c - 4\langle ik \rangle_c\Big)}_{\to \nabla^2 g(x,y)} = 0$$

$$1 - 4\beta J \sim t \quad \left\{\frac{kT_c}{J} = 2\right\}$$

$$\Leftarrow \quad (t - \beta J \nabla^2) g(x,y) = 0$$

$$g(k) \sim \frac{1}{t + \beta J k^2} \Rightarrow \eta = 0 \text{ in } \nu = \frac{1}{2}$$

MFA, torej zamenjava $\hat{A} \to \langle \hat{A} \rangle + \delta\hat{A}$, in zanemariti fluktuacij $\delta\hat{A}$, je ekvivalentno variacijski metodi: (Le Bellac, p. 194)

- naj bo H_λ nek enostaven H odvisen od $\vec{\lambda}$, npr.: brez interakcij

$\Downarrow$

$$F \leq \phi(\vec{\lambda}) = F_\lambda + \langle H - H_\lambda \rangle_\lambda$$

dk $\left\{ \begin{array}{l} -\mathrm{tr}\,\rho_\lambda \ln \rho_\lambda \leq -\mathrm{tr}\,\rho_\lambda \ln \rho \\ \text{konveksnost entropije (pozitivni koeficienti):} \\ \mathrm{tr}\,A\ln B - \mathrm{tr}\,A\ln A \leq \mathrm{tr}\,B - \mathrm{tr}\,A \\ f(\sum p_i x_i) \leq \sum p_i f(x_i) \end{array} \right\}$

ravnovesni p. glede na H_λ, ie $\sim e^{-\beta H_\lambda}$

Npr. za Isinga je $H_\lambda = \sum_i \lambda_i \sigma_i^z$

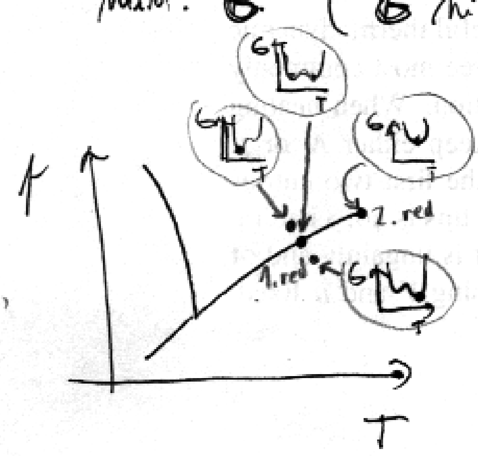
- minimizacija $\phi(\vec{\lambda})$ po λ_i da MF enačbe

<u>Landauova teorija</u> (Landau '36)

- velja le v bližini T_c, ni mikroskopske slike (za razliko od MFA, ki v principu tudi za $T \neq T_c$)

$\hookrightarrow$ tam je ekviv. MFA, saj zanemari fluktuacije

- ureditveni parameter m, ki je $\equiv 0$ za $T > T_c$ in $\neq 0$ pod T_c.
- prosto energijo razvijemo po potencah m. Ravnovesna vrednost m je tista, ki min. G (G ni analitična pri $m=0$!) Gibbsova $G(T, p, m, ..)$



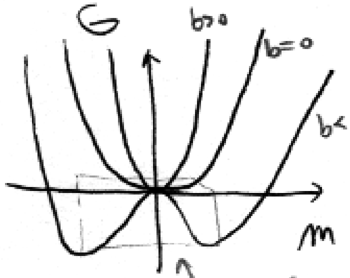
18.3.12

Razvoj za sistem s simetrijo $m \to -m$ (magnetni npr.)

$h=0$ $(c>0)$

$$G(T,m) = a(T) + \frac{1}{2} b(T) m^2 + \frac{1}{4} c(T) m^4 + \dots$$

Za $c>0$ in, da $b(T)$ spremeni predznak, $b(T) = b_0 (T - T_c)$



$$\left(\frac{\partial G}{\partial m}\right)_T = b(T) m + c(T) m^3 + \dots = 0$$

$$\Rightarrow m = \pm \sqrt{\frac{b_0}{c(T)}} \sqrt{T_c - T} \quad ; \beta = \frac{1}{2}$$

ta del, kjer je G konkavna je NEFIZIKALEN

to je prehod 2. reda ⇐ m je zvezen

Kapaciteta $\cancel{C = T\frac{\partial S}{\partial T}}$, $\cancel{S = -\frac{\partial G}{\partial T} = -a' - \frac{b'}{2} m^2 - \frac{c'}{4} m^4 - \frac{b}{2}(m^2)' + \dots}$

$$C = -Ta'' - Tb'(m^2)' - \frac{Tc(m^4)''}{4}$$

podobno razvoje za $C \Rightarrow \alpha = 0$ {C ima skok}

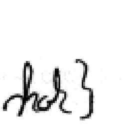
$h \neq 0$ dobimo, da v G dodamo člen $-m \cdot h$, i.e. $G = -m \cdot h + a(T) + b(T)\frac{m^2}{2} + \dots$

$$\gamma = 1 \text{ in } \delta = 3$$

poglej str. 38, potem to in str. 39

- Če bi $b(T)$ in $c(T)$ padla 0 hkrati $\Rightarrow \frac{b_0}{c(T)}$ divergira. Za funkcijo ene spremenljivke se to v splošnem ne zgodi, lahko pa za funkcijo dveh spremenljivk, npr.: T in p.

~~trojna točka~~



← vozelne krivulje $b(T,p)=0$ in $c(T,p)=0$

trikritična točka ≡ fiksirati treba 2 parametra

kjer pt postane 2nd

multikritična ≡ fiksirati treba n parametrov

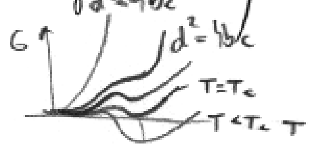
18.3.12

• Če je tudi kubični člen: (prehod 1. reda ≡ skok v $m(T_c)$)

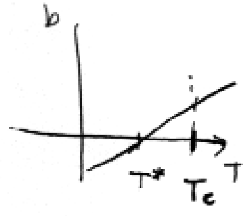
$$G = \frac{1}{2} b(T)\, m^2 - d(T)\frac{m^3}{3} + c(T)\frac{m^4}{4} + \dots$$

$b = b_0(T - T^*) + \dots$

(drugačen predznak $d(T)$ je enakovreden $m \to -m$)



$$\frac{\partial G}{\partial m} = 0 = bm - dm^2 + cm^3$$

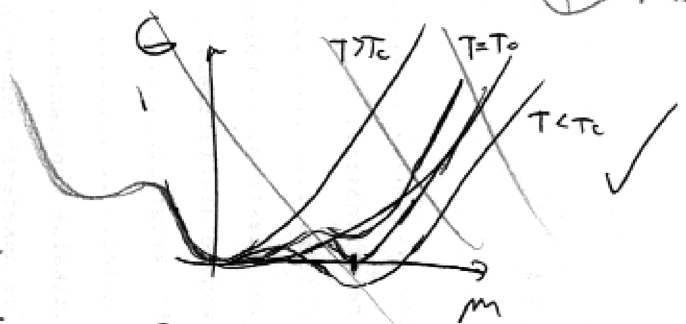


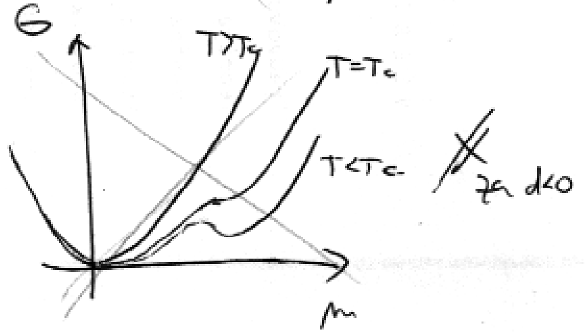
$\Downarrow$

$m_0 = 0$

$m_0 = \cancel{\frac{2d}{3c}}$

$$m_0 = \frac{d \pm \sqrt{d^2 - 4bc}}{2c}$$





• za $d^2 < 4bc$ le $m_0 = 0$

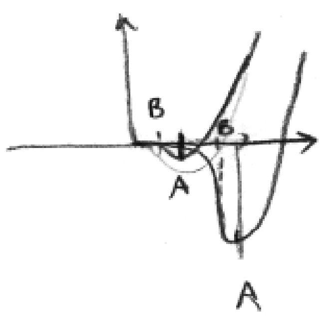
• ko je b manjši, pa pri $d^2 = 4bc$ tudi nov minimum pri m. Ta postane globalni, ko je $G(m_0) = 0$

$\Downarrow$

$$m_c = \frac{2}{3}\frac{d}{c} \quad \text{in} \quad b_c = m_c(d - c m_c) = \frac{2d^2}{9c} > 0$$

prehod 1. reda, ker m_c skoči iz $m = 0$ na $m_c \neq 0$ pri T_c.

+ zakaj Landau odpove ne da pravih kritičnih? jasno, ni fluktuacij



A: najverjetnejši m

B: povprečni m

Ko je m majhen, se precej razlikujeta A in B. V bistvu bo za B eksponent manjši kot $\frac{1}{2}$, ker bo bolj "ostro" šel $\to 0$.

• kaj pa, če je $C(T) < 0$?

$$G = \frac{1}{2} b m^2 + \frac{1}{4} c\, m^4 + \frac{1}{6} f m^6 + \ldots$$

{ $f > 0$ za stabilnost }

$$\frac{\partial G}{\partial m} = b m + c m^3 + f m^5 \Rightarrow \text{rešitve} \quad \begin{array}{l} m = 0 \\ m = \pm m_+ \\ m = \pm m_- \end{array}, \quad m_\pm^2 = \frac{1}{2f}\left(-c \pm \sqrt{c^2 - 4fb}\right)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial m^2} = b + 3 c m^2 + 5 f m^4$$

+ za $b < 0$ je $m = 0$ max. $\{ G''(0) = b \}$

$$G''(m_\pm) = \pm \frac{1}{f} \sqrt{c^2 - 4bf}\; m_\pm^2 \Rightarrow m_+ \text{ je min.}$$

m_- je max. $\in \mathbb{C}$

a je prav?

+ za $b > 0$ je $m = 0$ min.

• $m_\pm$ sta kompleksna če je $c > 0$ (f je itak)

• če je $c < 0 \Rightarrow$ trije realni koreni, $0, \pm m_+$

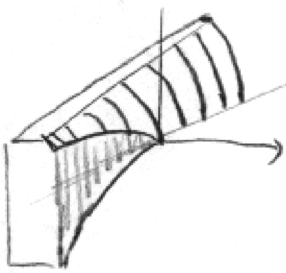
prehod, ko je $G(m_+) = 0$

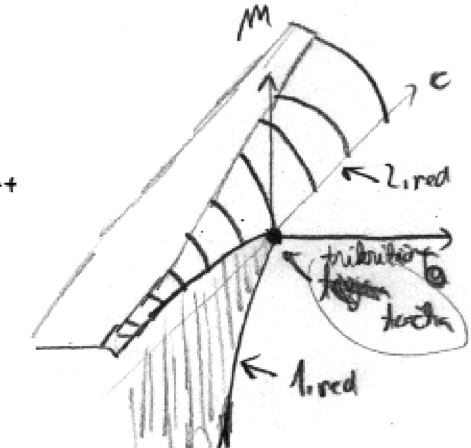
$$\Downarrow$$

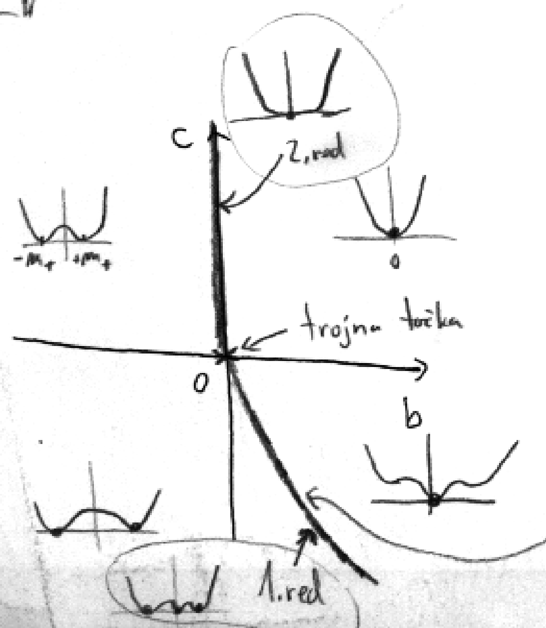
$$m_+^2 = -4\frac{b}{c}$$

$$\Downarrow$$

$$c = -4\sqrt{\frac{bf}{3}} \quad : \text{kritična črta}$$







• v tej točki m skoči za $m_+ - 0 =$

$$= \sqrt{-\frac{4b}{c}} = \left(\frac{3b}{f}\right)^{1/4}$$

• v $b = c = 0$ je ~~trojna~~ trikritična točka z $\beta = \frac{1}{4}$!

"kritična točka za prehod 2. reda (in hkrati za 1. red)"

19.3.12

Renormalizacijska teorija F.P.

Idejo je '66 dal Kadanoff, razvili pa Wilson '71 in mnogi drugi.

- ob T_c $\xi \to \infty$, torej ni nobene naravne skale več, npr.: medmrežne a. Fiziko narekuje dinamika.

- ob T_c so fluktuacije na vseh skalah = sebipodobnost

⇓

Če "pozoomiramo" vidimo enako sliko

⇓

namesto neposredne interakcije med spini naredimo "coarse-graining".

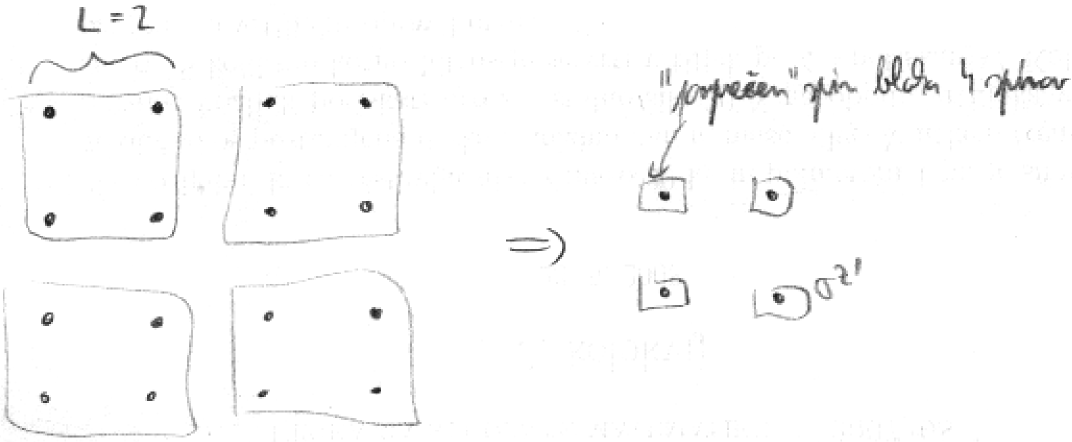
Blok ~~Gruča~~ spinov nadomestimo z enim in potem gledamo interakcije med bloki. Ker je sistem skalirno invarianten, bo H_{blok} enake oblike kot H, le parametri bodo morda drugačni.

⇓

skalirna oblika proste energije, ki je homogena funkcija h in T.

⇓

Kadanoff je tako dobil zveze med kritičnimi eksponenti

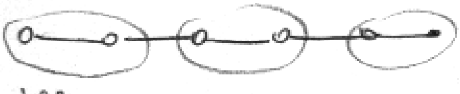


$$H = -J\sum \sigma^z_i \sigma^z_j - h\sum \sigma^z_i \implies H' = -J'\sum' \sigma^{z'}_i \sigma^{z'}_j - h'\sum_i \sigma^{z'} \quad \{\text{blizu } T_c\}$$

$F(t,h)$ gostota proste energije $f(t,h) = \frac{1}{L^d} f(t',h')$ $\quad t' = L^p t\ ,\ h' = L^q h$

Primer 1d Ising (ni generično obnašanje!)

{Huang}
{Pathria 343-346, 559}



$$H = -J\sum \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h\sum \sigma_i^z - C\sum_i 1$$

blok 2 spinov

{ vrednost blok-spina bo kar vrednost prvega v bloku

$\uparrow\uparrow \to \uparrow$

$\uparrow\downarrow \to \uparrow$

$\downarrow\downarrow \to \downarrow$

$\downarrow\uparrow \to \downarrow$ } $\Rightarrow$ to je enako, kot če v Z seštejemo čez sode spine

$$Z_N = \mathrm{tr}\, e^{-\beta H} = \sum_{\sigma_i^z} \exp\Big(\sum_i K_0 + K_1 \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \tfrac{1}{2}K_2(\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z)\Big)$$

$$= \sum^N \prod_{i=1}^{N/2} \exp\Big(2K_0 + K_1\big[\sigma_{2i-1}^z\sigma_{2i}^z + \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z\big] + \tfrac{1}{2}K_2\big[\sigma_{2i-1}^z + 2\sigma_{2i}^z + \sigma_{2i+1}^z\big]\Big) \qquad K_0 = 0,\ K_1 = \beta J,\ K_2 = \beta h$$

seštejemo najprej po sodih σ_{2i}^z:

$$= \sum^{N/2} \prod_{i=1}^{N/2} e^{2K_0}\, 2\,\mathrm{ch}\big(K_1[\sigma_{2i-1}^z + \sigma_{2i+1}^z] + K_2\big) \exp\Big(\tfrac{1}{2}K_2[\sigma_{2i-1}^z + \sigma_{2i+1}^z]\Big)$$

$$\overset{\text{podef.}}{=} \sum^{N/2} \exp\Big(\sum_{i=1}^{N/2} K_0' + K_1' \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \tfrac{1}{2}K_2'(\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z)\Big)$$

da bosta dva izraza enaka, mora veljati {rešiter vedno 3, ker ima $\sigma_{2i-1}^z + \sigma_{2i+1}^z$ lahko vrednosti $-2, 0, +2 \Rightarrow$ 3 enačbe}

$$e^{K_0'} = 2e^{2K_0}\big[\mathrm{ch}(2K_1+K_2)\,\mathrm{ch}(2K_1-K_2)\,\mathrm{ch}^2 K_2\big]^{1/4}$$

$$e^{K_1'} = \big[\mathrm{ch}(2K_1+K_2)\,\mathrm{ch}(2K_1-K_2)/\mathrm{ch}^2 K_2\big]^{1/4}$$

$$e^{K_2'} = e^{K_2}\big[\mathrm{ch}(2K_1+K_2)/\mathrm{ch}(2K_1-K_2)\big]^{1/2}$$

$$Z_N(K_0, K_1, K_2) = Z_{N/2}(K_0', K_1', K_2')$$

preslikava $(K_0,K_1,K_2) \to (K_0',K_1',K_2') \to \dots$

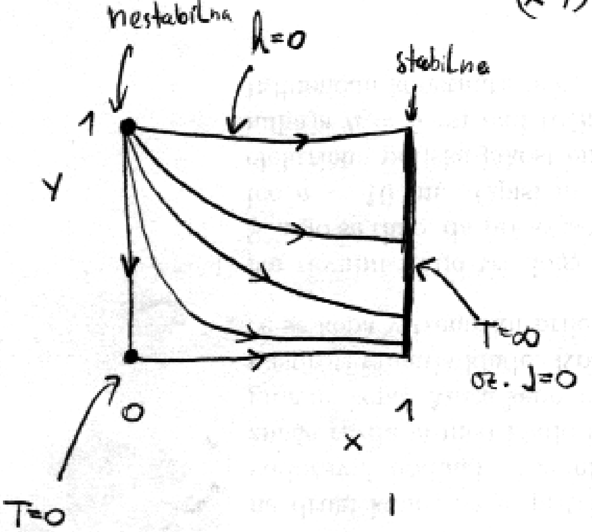
sistem N spinov $\to$ $\frac{N}{2}$ spinov z renormaliziranimi parametri

$$x \equiv e^{-4K_1} \qquad y \equiv e^{-2K_2} \qquad w \equiv e^{-4K_0}$$

zgornje tri enačbe so

$$x' = x\,\frac{(1+y)^2}{(x+y)(1+xy)} \qquad y' = y\,\frac{x+y}{1+xy}\,, \qquad w' = w^2\,\frac{xy^2\cancel{(1+y)^2}}{(x+y)(1+xy)(1+y)^2}$$

ξ



fiksne točke (x,y):

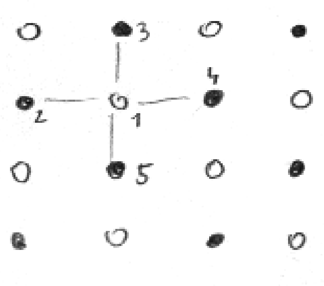
- $(0,0)$ $T=0$ feromagnet, $\xi=\infty$
- $(1,y)$ $T=\infty$ paramagnet, $\xi=0$
- $(0,1)$ $J=\infty, h=0, T>0$

1d Ising na žalost nima generičnega obnašanja:

- fiksne točke so trivialne
- M.M. se po RG spet eksaktno zapiše z M.M. To je res le v 1d! ← smo naredili kar točen račun, brez da bi korelacijske razdalje zanemarili. Je točen za poljuben K, ne le v bližini T_c.

2d Ising {Pathria}

$$Z_N = \sum_{\sigma_i^z} e^{K\sum_{nn}\sigma_i^z\sigma_j^z} \qquad K=\beta J$$



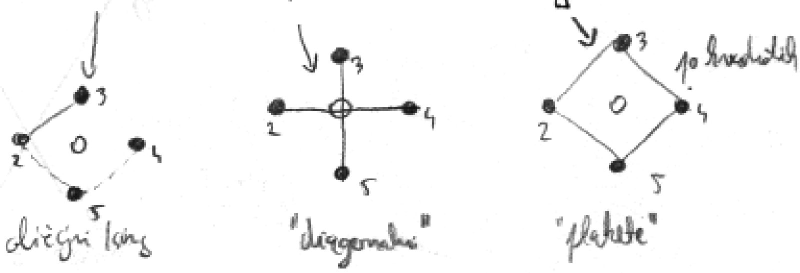
seštejemo čez polovico spinov, čez O.

$$Z = \sum \prod \exp\left(K\{\sigma_1^z(\sigma_2^z+\sigma_3^z+\sigma_4^z+\sigma_5^z)\}\right) =$$

$$= \sum{}' \prod{}' \; 2\,\mathrm{ch}\left(K(\sigma_2^z+\sigma_3^z+\sigma_4^z+\sigma_5^z)\right)$$

tak $Z()$ bi radi zapisali v eksponentni obliki, da bo H' podobne oblike kot na začetku. Toraj reda, po prvi iteraciji imamo tako

$$Z_N = \sum^{N/2} e^{\frac{N}{2}K_0'} \exp\left[K'\sum_{n.n.} \sigma_i^z\sigma_j^z + L'\sum_{n.n.n.} \sigma_i^z\sigma_j^z + M'\sum_{\square} \sigma_i^z\sigma_j^z\sigma_k^z\sigma_l^z\right]$$



$K_0' = \ln 2 + \frac{1}{2}\ln ch 2K + \frac{1}{8}\ln ch 4K$

$M' = \frac{1}{8}\ln ch 4K - \frac{1}{2}\ln ch 2K$

$L' = \frac{1}{8}\ln ch 4K$

$K' = \frac{1}{4}\ln ch 4K$

Iz n.n. H smo dobili tudi n.n.n. in $\square$ sklopitve. To je splošno v več dimenzijah kot 1d, ker so npr. n.n.n. sklopljeni preko vmesnega soseda.

Jasno je, da če naredimo sumacijo še na plovki, bomo dobili še bolj "oddaljene" sklopitve!

Po n korakih tega postopka imamo $H^{(n)}$ s kupom parametrov.

Potrebno je narediti <u>približek</u>.

Npr.: za <u>majhne K</u>, je $M' \sim O(K^4)$, ker ga bomo zanemarili, ostale pa tudi razvijemo!

$$L' = K^2 + \dots \qquad K' = 2K^2 + \dots \qquad M' = 0 + \dots$$

če bi začeli z neničelnim L, pa imamo $L' = K^2$, $K' = 2K^2 + L$

Torej enostavna 2D preslikava: fiksna točka: • $(K,L)=(0,0)$ trivialna (∞,∞)

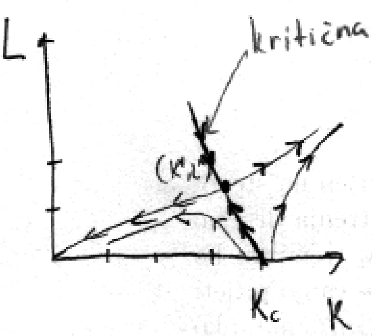
• $(K^*,L^*) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{9}\right)$ hiperbolična

linearizamo preslikavo okoli (K^*_4, L^*_4), in dobimo

$$\Delta K' = \frac{4}{3}\Delta K + \Delta L \qquad , \Delta L' = \frac{2}{3}\Delta K$$

$$\begin{pmatrix} \Delta K' \\ \Delta L' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4/3 & 1 \\ 2/3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K \\ \Delta L \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 \doteq \frac{2+\sqrt{10}}{3} \doteq 1.72 \quad \lambda_2 = \frac{2-\sqrt{10}}{3} \doteq -0.39$$



$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 2+\sqrt{10} \\ 2 \end{pmatrix} \qquad \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 2-\sqrt{10} \\ 2 \end{pmatrix}$$

(K^*, L^*) še ni fizikalna kritična točka, ker ima naš H $L=0$.

$\Rightarrow$ po stabilni smeri do $L=0$ nam bo dalo K_c.

Če tam potegnemo premico v smeri ~~...~~ kritične črte, dobimo

$$K_c = \frac{1}{3} - \frac{1}{9}\cdot\frac{3}{2+\sqrt{10}} = \frac{4+\sqrt{10}}{18} = \underline{\underline{0.398}}$$

(točna vrednost je 0.441)

Skaliranje ξ:

Z eno iteracijo smo šli iz $N \to \frac{N}{2}$, to je tako, kot da bi imeli blok z medmrežno razdaljo $a' = \sqrt{2}a$, $\quad N' = \frac{N}{2}\left(\frac{a}{a'}\right)^2$.

Po m iteracijah $\quad a^{(m)} = (\sqrt{2})^m \cdot a \qquad$ Če je na začetku korelacijska ξ, bo po m-iteracijah

$$\xi^{(m)} = \xi \cdot \frac{1}{(\sqrt{2})^m}$$

a hkrati iz $K \to K^{(m)}$ oz. iz $\Delta T = T - T_c \to \Delta T^{(m)} = \Delta T \lambda_1^m$

$$\xi \sim (\Delta T)^{-\nu} \qquad \text{in} \quad \xi^{(m)} \sim (\Delta T^{(m)})^{-\nu}$$

$\xi\sqrt{2}^{-m} \sim \Delta T^{-\nu}\lambda_1^{-\nu m}$

$$\nu = \frac{\ln\sqrt{2}}{\ln\lambda_1} \doteq \underline{\underline{0.64}} \quad (\text{točen je } 1)$$

Dobiti: nismo samo matematičnih vrednosti: • treba upoštevati tudi vsoj B

• K^* ni samo majhen

• da bi dobili tudi npr.: η bi morali še reskalirati spin.

~~(da bi bilo~~

Formalna izpeljava:

Fizikalno ozadje:

• vzamemo blok L in ga opišemo z enim spinom.

a) V bloku je bilo L^d spinov

Kako predpišemo reprezentativni spin za blok je na nas; lahko npr.: povprečni spin, ali npr.: večinsko vlogo

↓ zvezna spremenljivka — ↓ -1 ali $+1$

en korak RG

b) eventualno reskaliramo nov spin, da so vrednosti (fluktuacije) enake, kot pred skaliranjem.

c) poskušamo zapisati H' za bloke. Dobimo nove parametre $\vec{K}'$

Matematično:

$$H = H(\vec{K}) \qquad \vec{K} = (K_0, K_1, \ldots)$$ parametri H-ja, v principu neskončno mnogo

$\downarrow$ RG

$$H' \neq H(\vec{K}') \quad , \; H' = \frac{N}{L^d} \quad , \; \xi' = \frac{\xi}{L}$$

formalno lahko pišemo $\vec{K}' = \vec{R}(\vec{K})$ nelinearna funkcija (polgrupa)

ta preslikava ima fiksne točke $\vec{K}^*$

$$\vec{K}^* = \vec{R}(\vec{K}^*) \Rightarrow \xi(\vec{K}^*) = \xi' = \frac{\xi}{L}$$

$\Downarrow$

v fiksni točki $\xi = 0$ ali ∞

trivialno, npr. $T=\infty$ ali $\vec{K}=0$ — zanimivo vse točke, ki pripeljejo v $\vec{K}^*$ imajo $\xi = \infty$ $\Rightarrow$ KRITIČNA MNOGOTEROST (površina, črta, ...)

v okolici $\vec{K}^*$ preslikavo lineariziramo:

$$\Delta \vec{K}' = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{K}}\Big|_{\vec{K}^*} \Delta \vec{K} \equiv \underbrace{A^*}_{\text{matrika}} \Delta \vec{K}$$

lastne vrednosti λ_i in vektorji $\vec{x}_i$:

$$\Delta \vec{K} = \sum_i \underbrace{c_i}_{\text{koef. razvoja}} \vec{x}_i$$

(skalarna polja = kombinacije K_j)

$$A^* \Delta \vec{K} = \sum_i \underbrace{\lambda_i c_i}\, \vec{x}_i$$

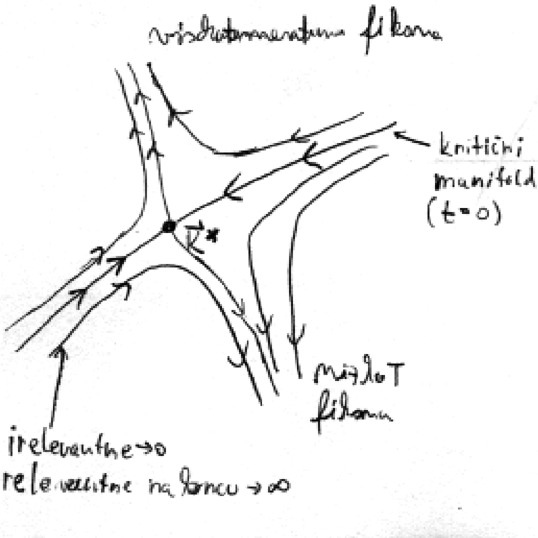
$$c_i' = \lambda_i c_i$$

po n iteracijah A^{*n} $\qquad \lambda_i^n c_i$

ker je RG polgrupa, in je vseeno za L in $\tilde{L}$ enkrat, kot za $L\tilde{L}$ naenkrat, torej

$$\lambda(L)\lambda(\tilde{L}) = \lambda(L\tilde{L}) \Rightarrow \lambda_i = L^{y_i}$$

- $\lambda_i > 1$: x_i je relevantna spremenljivka, s časom narašča in postaja pomembnejša
  na kritični mnogoterosti so vse relevantne $\equiv 0$ (primer je temperatura in h)
- $\lambda_i < 1$: irelevantna spremenljivka, ker gre $\to 0$.
- $\lambda_i = 1$: marginalna; lahko da log popravke



+ vse točke na krit. vodijo v isti $\vec{K}^*$
UNIVERZALNOST

+ če smo zelo blizu kritičnega, se približamo $\vec{K}^*$.
Ko smo tam so irelevantne $\equiv 0$.

prosta energija je odvisna le od $\vec{K}$, torej le od relevantnih spremenljivk

+ ko delamo renormal. se relevantne večajo, npr.: $t \sim 1$ takrat ko je $\xi^{(n)} \sim \frac{\xi}{L^n} \sim 1$

$\Downarrow$

singularni del F:

$$\text{gostota } f = \frac{F}{N^d}, \quad f(\overset{x_1}{\underset{\|}{\mu_1}} t, \overset{x_2}{\underset{\|}{\mu_2}} h, \dots) = \underbrace{\frac{1}{L^{md}}}_{\substack{\text{zaradi} \\ \text{gostote} \\ \text{(povečava)}}} \underbrace{f(\lambda_1^m t, \lambda_2^m h, \dots)}_{\text{ker je } H^{(m)} \text{ enak, le z drugimi konst.}}$$

$\Downarrow$

f je homogena funkcija $t, h, \dots$ in še $\lambda_1 = L^{y_1}, \dots$

$$f(L^{my_1} t, L^{my_2} h, \dots) = L^{md} f(t, h, \dots)$$

za $L^{my_1} = \frac{1}{t}$ oz. $L = t^{-1/y_1 m}$

$\cancel{f(1, L^{y_2} h, \dots) = L}$

$$f\left(1, \frac{h}{t^{y_2/y_1}}, \dots\right) = \frac{1}{t^{d/y_1}} f(t, h)$$

iz $\xi^{(m)} = \frac{\xi(t, h)}{L^m} = \xi(\underset{t^{(m)}}{\underset{\|}{\lambda_1^m t}}, \lambda_2^m h, \dots)$ imamo $t^{-\nu} \sim \xi$ za dolžino

pri 2D brezgovi:

$\nu = \frac{\ln\sqrt{2}}{\ln\lambda} =$

$$L^m (L^{my_1} t)^{-\nu} = t^{-\nu} \Rightarrow \nu = \frac{1}{y_1}$$

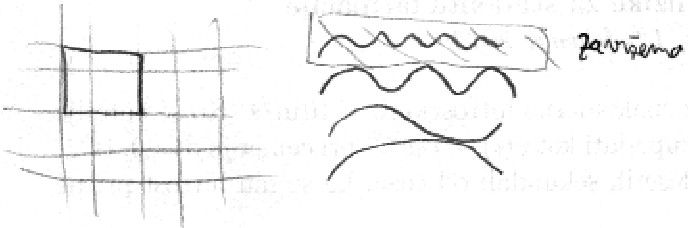
$\nu = \frac{\ln L}{\ln L^{y_1}} = \frac{1}{y_1}$

Torej skalirna hipoteza

$$f(t, h, \dots) = t^{d\nu} \tilde{f}\left(\frac{h}{t^{y_2 \nu}}\right)$$

; to določi vse zveze med eksponenti

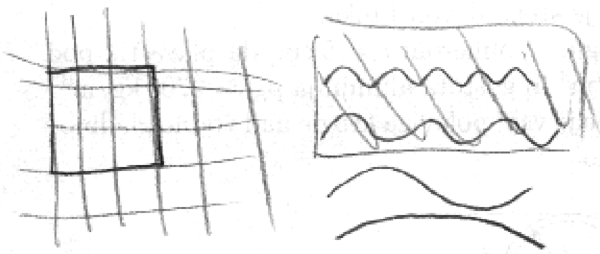
RG transformacija je v bistvu coarse-graining, s katerim zgubljamo majhne λ oz. velike k-je. V momentnem prostoru je to tako, kot da bi zavrgli največje k-je.



Včasih lahko tudi RG delamo lepše v k-prostoru.

- odrežemo velike k → H'
- reskaliramo
- spet odrežemo → H''

(Huang)



Kosterlitz-Thouless prehod

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j)$$, npr: 2D lattice
zvezen svet

- zvezna simetrija ⇒ po Mermin-Wagnerju ta ne more biti zlomljena pri končni T.

- je prehod brez korelacij dolgega reda (v stilu meditve Π)

- zvezni kontinuum osnovnega stanja

- razvoj $\cos()$ za male kote (nizke T) ⇒ {spinski valovi}

  korelacijska f. faktor $g(r) \sim r^{-c \cdot T}$ (dobro le za dovolj male T)

  "Svet, da bi bili skor na prehodu, a z $\eta(T)$".

dejansko: low T = kritična faza → high T, ni korelacij $(e^{-r/\xi(T)})$
spinski valovi — navezane vrtinči
vrtinci so vezani v pare vrtinec-anti

 1.4.12

Transportni koeficienti

Oglejmo si sisteme v stacionarnih stanjih izven ravnovesja. Ta ~~stak~~ neravnovesna stanja naj bodo še vedno v lokalnem ravnovesju:

+ lokalne celice, ki so dovolj majhne, da npr. $T(x)$ ne variira čez celico, a dovolj velike, da velja TD limita.

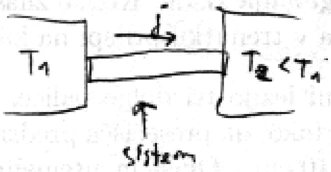
Npr: v Ar pri $p = 1\,\mathrm{bar}$ in $300\,K$ merojo velikost ~ "celici" fluktuacij reda (TD limita). To pomeni, da je za $l \sim 0.1\,\mu m$ $\frac{\Delta N}{N} \sim 0.005$.

Da je sprememba T čez celico l zanemarljiva $\Rightarrow$

$$\frac{l\,\nabla T}{T} \sim 0.005 \Rightarrow \quad \nabla T \sim 10^5\,K/cm$$

$$dS = dS_{ext} + dS_{int}$$

Npr: palica in prevajanje toplote



↑ zaradi toplotnega (ali delcev) iz ~~...~~ rezervoarjev v sistem

$dS_{int} \geq 0$:
- $= 0$ za reverzibilne
- > 0 za ireverzibilne procese, npr. transport, kjer se bo entropija generirala v palici.

(Lahko pa tudi okolico vključimo v "sistem" in je $S_{ext} = 0$)

$S = S(E, V, N)$ je funkcija ekstenzivnih količin $A_i = E, V, N, \ldots$

$\frac{\partial S}{\partial A_i} \equiv \gamma_i$ pripadajoča intenzivna količina $= \frac{1}{T}, \frac{p}{T}, -\frac{\mu}{T}, \ldots$

Npr.: $dS = \sum_i \frac{\partial S}{\partial A_i} dA_i = \frac{1}{T} \cdot dE + \frac{p}{T} \cdot dV - \frac{\mu}{T} \cdot dN$

V ravnovesju so γ_i enaki za različne dele v stiku.

Če je γ_i različen ~~na~~ različnih delih sistema ⇒ torej smo izven ravnovesja ⇒ bo prišlo do izmenjave A_i, tako da bo tekel tok.

Kontinuum:

$$\overset{\text{grad}}{\nabla}\gamma_i \equiv \mathcal{F}_i : \quad \text{afiniteta, "posplošena sila"}$$

termodinamična sila

$$\frac{1}{S}\frac{dA_i}{dt} \equiv j_i \quad : \text{tok, "fluks"} \quad ; \quad \frac{1}{V}A_i \equiv a_i \quad \text{"gostota"}$$

Tokovi j_i bodo funkcije "sil" $\mathcal{F}_i$. Za majhne tokove lahko odvisnost razvijemo:

$$\underbrace{j_i = L_{ij}\overset{\text{grad}}{\nabla}\gamma_j}= L_{ij}\mathcal{F}_j \quad ; \quad L_{ij} \equiv \text{transportni koeficienti}$$

L_{ii} : diagonalni

$L_{i\neq j}$: križni

za A_i velja kontinuitetna:

$$\frac{\partial a_i}{\partial t} + \operatorname{div} j_i = 0$$

(Če ni izotropna snov, je L_{ij} tenzor 2 reda, $(j_i)_\alpha = (L_{ij})_{\alpha\beta}\,\partial_\beta\gamma_j$)

entropija sistema

$$\frac{1}{V}\frac{dS}{dt} = \frac{ds}{dt} = \gamma_i\frac{\partial a_i}{\partial t} = -\gamma_i \operatorname{div} j_i = -\operatorname{div}(\gamma_i j_i) + j_i \cdot \operatorname{grad}\gamma_i$$

$$\frac{ds}{dt} = -\operatorname{div}\underbrace{\left(\sum_i \gamma_i j_i\right)}_{j_S = \sum_i \gamma_i j_i} + \sum_i j_i \mathcal{F}_i$$

entropijski tok, ki teče skozi sistem (iz)

$$\frac{dS}{dt} = -\underbrace{\oint \sum_i \gamma_i\, j_i\, d\vec{S}}_{\text{površinski člen}} + \underbrace{\int dV \sum_i j_i \mathcal{F}_i}_{\frac{dS_{int}}{dt}}$$

Če je ravn. v sistemu, je $=0$, sicer pa predstavlja $\frac{dS_{ext}}{dt}$

$\frac{dS_{int}}{dt}$ notranje generiranje entropije

$$\sigma_s \equiv \sum_i j_i \mathcal{F}_i = \sum_i j_i \,\mathrm{grad}\,\gamma_i$$

"entropy production"
gostota produkcije entropije

Vidimo, da j_i in $\mathrm{grad}\,\gamma_i$, ki nastopata v σ_s, nastopata tudi v $j_i = L_{ij}\,\mathrm{grad}\,\gamma_j$!
Če želimo, da bo L_{ij} imel določene simetrije (koreje), je treba vzeti količine v σ_s.

$$\sigma_s = \sum_{ik} L_{ik}\mathcal{F}_k \mathcal{F}_i$$

Če v sistem vključimo tudi rezervoarje, je $\frac{dS}{dt} = \sigma_s \geq 0$

$$\Rightarrow \sigma_s \geq 0 \quad \text{oz.} \quad L_{ik} \geq 0$$

nenegativna oz. pozitivno definitna (>0 za $x \neq 0$)

Primera: palica: $\gamma = \frac{1}{T}$, $\mathcal{F} = \nabla\frac{1}{T}$, $j_E = -K\nabla T$

$j_E = L_{EE}\cdot\left(\nabla\frac{1}{T}\right) = -L_{EE}\frac{\nabla T}{T^2}$ $\Bigg\}$ $K = \frac{L_{EE}}{T^2}$

$j_S = \gamma_i j_i = \frac{j_E}{T}$ oz. $TdS = dE$ ✓

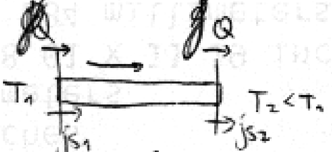
$\mathcal{F} = -\frac{\nabla T}{T^2}$

j_s ni konst. vzdolž palice!

$j_Q = j_E$

$$\sigma_s = L_{EE}\cdot\left(\frac{dT}{dx}\frac{1}{T^2}\right)^2 \geq 0$$
$$= L_{EE}\cdot\frac{-j_Q}{L_{EE}}\cdot\frac{dT}{dx}\frac{1}{T^2}$$

$j_E = \frac{dE}{dtS} = \text{konst.} = \frac{dQ}{dtS} = j_Q$



$S j_Q = \frac{dQ}{dt}$

rezervoar je velik, kvazi-statičen $\Rightarrow$ reverzibilen $\Rightarrow dS = \frac{dQ}{T}$

$\frac{dS_{ext}}{dt} = +\frac{\dot{Q}}{T_1} - \frac{\dot{Q}}{T_2} < 0$

$\frac{dS_{int}}{dt} = \int \sigma_s dx = -\frac{dS_{ext}}{dt}$

$\Big\}$ ker je stacionarno je $\frac{dS}{dt} = 0$

$$-j_Q\int\frac{dT}{dx}\frac{1}{T^2}dx = j_Q\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

toliko, kot se je producira, tudi odteče v bath.

energija + delci:

A.) $j_E = L_{EE}\nabla\frac{1}{T} + L_{EN}\nabla\left(-\frac{\mu}{T}\right)$

$j_N = L_{NE}\nabla\frac{1}{T} + L_{NN}\nabla\left(-\frac{\mu}{T}\right)$

toplotna prevodnost $j_E = -K\nabla T$ je def. pri $j_N = 0$.

$\Downarrow$

$L_{NE}\nabla\frac{1}{T} + L_{NN}\nabla\left(-\frac{\mu}{T}\right) = 0$

$\Downarrow$

$$j_E = L_{EE}\nabla\frac{1}{T} + L_{EN}\left(-\frac{L_{NE}}{L_{NN}}\right)\nabla\frac{1}{T} \Rightarrow K = \frac{L_{EE}L_{NN} - L_{EN}^2}{T^2 L_{NN}}$$

$L_{NE} = L_{EN}$

pozitivnost L pomeni pozitivnost K

(det >0 in diagonalni >0)

Onsagerjeve recipročne zveze (Onsager '31, Casimir '45)

Količine z dobro parnostjo $\varepsilon_i = \pm 1$ glede na anti~~unitarni~~ linearni in antiunitarni obrat časa $T = K \cdot e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y}$

E, H imajo $\varepsilon = +1$

gibalna ima $\varepsilon = -1$

$$T A(t) T^{-1} = \varepsilon A(-t)$$

v klasični obrne smeri, v kvantni pa kompleksna konjugacija + rotacija

Če ni mag. polja, je Onsager pokazal, da je $L_{ij} = L_{ji}$

Bolj splošno pa

$$L_{ij}(\gamma_\lambda, \vec{B}, \vec{\omega}) = \varepsilon_i \varepsilon_j L_{ji}(\varepsilon_\lambda \gamma_\lambda, -\vec{B}, -\vec{\omega})$$

Coriolisova

"Dokaz": potrebno narediti povezavo z mikroskopskim gibanjem.

Fluktuacije: + verjetnost $p \propto \exp\left(\frac{S}{k}\right)$ $\{$obrnemo $S = k \ln \Omega\}$

+ blizu ravnovesja S razvijemo; Gaussovske flukt.

+ vračanje v ravnovesje iz fluktuacij iste enačbe z L_{ij}!

$\delta \dot{a}_i \sim L_{ij} \xi_j$ (regresijska hipoteza)

$$\langle \delta a_i T^{-1} T \delta a_j(t) T^{-1} T \rangle = \langle T \delta a_i T^{-1} \delta a_j(-t) \rangle$$

$$\langle \delta a_i \delta a_j(t) \rangle = \langle \delta a_i \delta a_j(-t) \rangle = \langle \delta a_i(t) \delta a_j \rangle$$

time-reversal

$\Downarrow$

$$\langle \delta a_i \delta \dot{a}_j \rangle = \langle \delta \dot{a}_i \delta a_j \rangle$$

$$L_{j\lambda} \langle \delta a_i \delta a_\lambda \rangle = L_{i\lambda} \langle \underbrace{\delta a_\lambda \delta a_j}_{\delta_{\lambda j}} \rangle$$

$$L_{ji} = L_{ij}$$

Lahko pa tudi dokaz iz simetrijskih lastnosti χ susceptibilnosti po F.-D. izreku

7.12

⇓ naloga energija + delci

koj je tok entropije?

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_S = j_S =$$

zaprt sistem

B.) in toplote

v rezervoarju znotraj neurejeno

$$TdS = dQ$$

$$dE = dQ + \mu dN$$

$$dQ = TdS = dE - \mu dN$$

$$\Downarrow$$

$$j_Q = T j_S = j_E - \mu j_N$$ toplotni tok

$$j_S = \underbrace{\frac{j_E}{T}}_{\gamma_1} - \underbrace{\frac{\mu}{T}}_{\gamma_2} j_N = \sum \gamma_i j_i$$

isto kot za Fourierov j

$$-\operatorname{div} j_S + \sigma_S = 0$$

$$\left(\frac{dS}{dt} \text{ v sist. je } 0 \text{ ; ie, stacionarne razmere}\right)$$

$$\sigma_S = \sum_i j_i \mathfrak{F}_i = j_E \cdot \nabla \frac{1}{T} + j_N \nabla\left(-\frac{\mu}{T}\right)$$

Če sedaj izrazimo σ_S z j_Q in j_N, imamo

$$\sigma_S = j_E \nabla \frac{1}{T} - \mu j_N \nabla \frac{1}{T} - \frac{j_N}{T} \nabla \mu = j_Q \nabla\left(\frac{1}{T}\right) - j_N \frac{\nabla \mu}{T}$$

$$\Downarrow$$

$$j_N = L_{11} \frac{\nabla(-\mu)}{T} + L_{12} \nabla \frac{1}{T}$$

$$j_Q = L_{21} \frac{\nabla(-\mu)}{T} + L_{22} \nabla \frac{1}{T}$$

$$L_{12} = L_{21}$$

iz primerjave imamo:

$$L_{11} = L_{NN} \qquad L_{12} = L_{NE} + \mu L_{NN}$$

$$L_{21} = L_{EN} - \mu L_{NN} \qquad L_{22} = L_{EE} - \mu(L_{EN} + L_{NE}) + \mu^2 L_{NN}$$

Teorija linearnega odziva
(Pottier)

Pogosto ugotavljamo (eksperimentalno) lastnosti sistema tako, da na njega delujemo z zunanjo silo in gledamo odziv. Da bo odziv odvisen predvsem od sistema, mora biti sila majhna. Več načinov:

+ merimo odziv (v času) → odzivna f.
+ odziv na harmonsko silo → posplošena suscept. (Fourier)
+ relaksacija, ko silo umaknemo

vse te situacije opisuje linearni odziv: vse to izrazimo z ravnovesnimi korelacijskimi funkcijami = Kubove formule

(= 1. red perturbacije v ρ)

Izpeljava: sistem H_0, ki je do t_0 v ρ_0. Npr.: v ravnovesju $\rho_0 \sim e^{-\beta H}$, od t_0 pa ni več v stiku z rezervoarjem

od t_0 $H = H_0 + H_1$, $H_1 = -a(t)\, A$ ← "konjugirana" opazljivka (M, P) operator

↑ zunanja sila (B, E, ...)

za $t > t_0$:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i\mathcal{L}\rho$$

→ Liouvillov operator (superoperator), $\mathcal{L}\rho = \frac{1}{\hbar}[H,\rho]$

$$\mathcal{L} = \underset{H_0}{\mathcal{L}_0} + \underset{H_1}{\mathcal{L}_1}$$

pišemo $\rho(t) = \rho_0 + \delta\rho(t)$, $\delta\rho(t_0) = 0$ $\{\mathcal{L}_0\rho_0 = 0\}$

$$\frac{d\,\delta\rho(t)}{dt} = -i\mathcal{L}_1\rho_0 - i\mathcal{L}_0\,\delta\rho(t) - i\mathcal{L}_1\,\delta\rho(t)$$

↑ drugega reda ga zanemarimo

Če ne bi bilo 1. člena, bi $\delta\rho(t) = e^{-i\mathcal{L}_0 t}\delta\rho(t_0) \Rightarrow$ nastavek $\delta\rho(t) = e^{-i\mathcal{L}_0 t} R(t)$

$$\frac{dR}{dt} = (e^{i\mathcal{L}_0 t})(-i\mathcal{L}_1^{(t)}\rho_0) \quad , \quad R(t_0) = 0$$

⇓ rešitev

$$R(t) = -i\int_{t_0}^{t} e^{i\mathcal{L}_0 t'}\mathcal{L}_1^{(t')}\rho_0\, dt'$$

⇓

$$\delta\rho(t) = -i\int_{t_0}^{t} e^{-i\mathcal{L}_0 (t-t')}\mathcal{L}_1^{(t')}\rho_0\, dt'$$

v kvantnem $\mathcal{L}_1\rho_0 = \frac{1}{\hbar}[H_1,\rho_0]$, $\delta\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{-i\mathcal{L}_0 (t-t')}[H_1^{(t')},\rho_0]\, dt'$

$$\delta\rho(t) = \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} a(t')e^{-i\mathcal{L}_0 (t-t')}[A,\rho_0]\, dt'$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} a(t')[A^I(\overbrace{t'-t}^{t'-t}),\rho_0]\, dt'$$

pač predznak

analogija za A^I z e^{-itH}: $\{\mathrm{tr}(A_S(t)) = \mathrm{tr}(A e^{-i\mathcal{L}t}\rho) = \mathrm{tr}(A(t)\rho)\}$

interakcijska slika $A^I(t) \equiv e^{i\mathcal{L}_0 t}A = e^{iH_0 t/\hbar}A\, e^{-iH_0 t/\hbar}$

Pričakovana vrednost operatorja B

$$\langle B(t)\rangle_a = \mathrm{tr}(B\rho(t)) \quad \text{izven ravnovesja}$$

$$= \underbrace{\langle B\rangle_{eq}}_{0} + \mathrm{tr}(B\,\delta\rho(t))$$

$t_0 \to -\infty$

$$\langle B(t)\rangle_a = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} a(t')\,\mathrm{tr}([A^I(t'-t),\rho_0]B)\, dt' \overset{\text{ciklično}}{=} \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} a(t')\,\mathrm{tr}([B,A^I(t'-t)]\rho_0)\, dt' \overset{\text{stacionarnost eq}\,\langle\rangle}{=}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} a(t')\,\mathrm{tr}([B^I(t-t'),A]\rho_0)\, dt'$$

Kubova formula:

$$\boxed{\langle B(t)\rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty}\chi_{BA}(t-t')\,a(t')\,dt'}$$

konvolucija

Odzivna funkcija:

$$\boxed{\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\,\theta(t)\,\langle[B^I(t),A]\rangle_{eq}}$$

I v B^I pogosto izpustimo

Odzivne f. - lastnosti

+ če je $a(t)=\delta(t)\cdot a$

$$\Rightarrow \langle B(t)\rangle_a = a\,\chi_{BA}(t)$$

$\chi_{BA}(t)$ je torej odziv na "kick"; to je podobno konceptu Greenovih funkcij: $\frac{i}{\hbar}\theta(t)\langle[B(t),A]\rangle$ bi rekli retardirana Greenova funkcija

+ χ_{BA} je kavzalna; posledica sledi vzroku; $\Theta(t)$

+ če so ψ_n lastne od H_0 in E_n lastne vrednosti

$$\chi_{BA}(t)=\frac{i}{\hbar}\theta(t)\sum_{j,k}(p_j-p_k)e^{i\omega_{jk}t}B_{jk}A_{kj}$$

$$\hbar\omega_{jk}=E_j-E_k,\quad p_j=\langle\psi_j|\rho_0|\psi_j\rangle=\frac{e^{-\beta E_j}}{Z}$$

vsota oscilirajočih členov; za končni sistem $\chi_{BA}(t\to\infty)$ ne pada!

↑

sistem ima spomin

za neskončen sistem pa tipično $\chi_{BA}(t\to\infty)\to 0$

+ namesto komutatorja v χ lahko zapišemo tudi z navadno korelacijsko

$$\langle[B(t),A]\rangle = \mathrm{tr}((BA-AB)\rho_0) = \mathrm{tr}((A\rho_0-\rho_0 A)B(t)) = \mathrm{tr}([A,\rho_0]B(t))$$

velja enakost $[A,e^{-\beta H_0}] = e^{-\beta H_0}\int_0^\beta e^{\lambda H_0}[H_0,A]e^{-\lambda H_0}\,d\lambda$ {poglej si matrične}

⇓

$$[A,\rho_0] = -i\hbar\rho_0\int_0^\beta e^{\lambda H_0}\dot A e^{-\lambda H_0}\,d\lambda \qquad \{i\hbar\dot A=[A,H_0]\}$$

$$\chi_{BA}(t)=\Theta(t)\cdot\int_0^\beta\langle\dot A(-i\hbar\lambda)B(t)\rangle\,d\lambda$$

$$C(-i\hbar\lambda)=e^{\lambda H_0}Ce^{-\lambda H_0}$$

+ recipročne zveze :

antilinearen

$TiT^{-1}=-i$ oz. $Ti=-iT$

prod. antilinearen = lin. · K (kompleksna konjugacija)

⇓

$T = W\cdot K$ unitaren ($=e^{-iS_y\frac{\pi}{\hbar}}$; da se verjetnost ohranja)

⇒ antiunitaren

$\langle T\psi|T\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\psi\rangle$

torej

$\varepsilon_A = \pm 1$ parnost opazljivke A pri obratu mer časa T

$$TAT^{-1} = \varepsilon_A A(-t), \text{ npr.: } TxT^{-1} = x(-t), \quad TvT^{-1} = -v(-t)$$

$\sim \chi_{BA}$ nastopa $\langle B(t)A - AB(t)\rangle$ v ravnovesju. ~~Ker je to stacionarno~~

$$\Rightarrow \cancel{\langle B(t)A\rangle = \langle BA(-t)\rangle}$$

Če sta H_0 in ρ_0 invariantna na $T \Rightarrow \mathrm{tr}(B(t)\rho_0 A) =$

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle T\varphi|T\psi\rangle = \mathrm{tr}\left(T^{-1}B(-t)A(-0)T\right)\varepsilon_A\varepsilon_B = \mathrm{tr}\left((B(t)A)^\dagger\right)\varepsilon_A\varepsilon_B = \mathrm{tr}(A(t)B(0))\varepsilon_A\varepsilon_B = \cancel{\mathrm{tr}(B(-t)A(0))\varepsilon_A\varepsilon_B}$$

ključen korak; za antiunitarne ni cikličnosti

$$= \cancel{\langle BA(-t)\rangle\varepsilon_A\varepsilon_B} = \varepsilon_A\varepsilon_B\langle A(t)B\rangle$$

$\langle i|B|j\rangle = \langle TBj|Ti\rangle =$

$= \langle \underbrace{TBT^{-1}}_{B'}\underbrace{Tj}|\underbrace{Ti}_{=|i'\rangle}\rangle =$

$= \langle B'j'|i'\rangle = \langle j'|(TBT^{-1})^\dagger|i'\rangle$

$\Rightarrow \mathrm{tr}B = \mathrm{tr}(TBT^{-1})^\dagger$ oz.

$\mathrm{tr}B^\dagger = \mathrm{tr}(TBT^{-1})$

$$\Rightarrow \chi_{BA}(t) = \varepsilon_A\varepsilon_B\chi_{AB}(t)$$

(če H_0 ni invar. na T, je v njej treba $\vec{B}\to-\vec{B}$, $\vec{L}\to-\vec{L}$)

~~Zato~~ analogno Onsagerjevim recipročnim zvezam!

"Matrika" χ ima simetrijo.

Fourierova slika – posplošena susceptibilnost

Odziv na harmonično $a(t) = \mathrm{Re}(ae^{-i\omega t})$

$$\langle B(t)\rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty}\chi_{BA}(t-t')\,\mathrm{Re}(ae^{-i\omega t'})\,dt' = \mathrm{Re}\,a\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{BA}(t-t')e^{-i\omega t'}dt'$$

$$= \mathrm{Re}\Big(ae^{-i\omega t}\underbrace{\int_0^\infty \chi_{BA}(\tau)e^{i\omega\tau}d\tau}\Big)$$

$$= \chi_{BA}(\omega) = \int_0^\infty \chi_{BA}(\tau)e^{i\omega\tau}d\tau$$

$$\langle B(t)\rangle_a = \mathrm{Re}\left(ae^{-i\omega t}\chi_{BA}(\omega)\right), \quad \chi_{BA}(\omega) = \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega)$$

$$= a(\chi'\cos\omega t + \chi''\sin\omega t)$$

$$\langle B(\omega)\rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty}\langle B(t)\rangle_a e^{i\omega t}dt \Rightarrow \boxed{\langle B(\omega)\rangle_a = \chi_{BA}(\omega)\,a(\omega)}$$

jasno – konvolucija v "t"

15.4.12

Ker $\chi_{BA}(t\to\infty)$ nujno ni $=0$, je potrebna previdnost pri matematiki.

$\chi_{BA}(\omega)$ je porazdelitev, mera, kot npr. δ-funkcija.

Da je vse OK,

$$\chi_{BA}(\omega+i\varepsilon)=\int_0^\infty \chi_{BA}(t)\,e^{i\omega t}e^{-\varepsilon t}\,dt \qquad ,\ \varepsilon>0$$

$$\boxed{\chi_{BA}(\omega)=\lim_{\varepsilon\to0^+}\chi_{BA}(\omega+i\varepsilon)}$$

posplošena susceptibilnost

oz.

$$\chi(z)\equiv\int_0^\infty \chi_{BA}(t)\,e^{izt}\,dt \quad , \quad \mathrm{Im}(z)>0$$

$\longrightarrow$ analitična v zgornji polravnini

Če uporabimo za $\chi_{BA}(t)$ izraz v lastni bazi, imamo $\quad p_j=\langle j|\rho_0|j\rangle=\frac{e^{-E_j\beta}}{Z}$

$$\chi_{BA}(\omega)=\frac{1}{\hbar}\sum_{j,k}(p_j-p_k)B_{jk}A_{kj}\lim_{\varepsilon\to0^+}\frac{1}{\omega_{kj}-\omega-i\varepsilon}$$

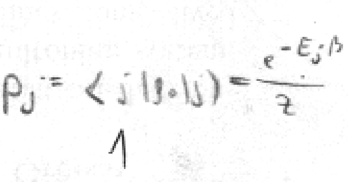
$\{\ \chi(t)$ oscilacije $\Rightarrow \chi(\omega)$ poli $\}$

$$\chi_{BA}(t)=\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\sum_{j,k}(p_j-p_k)B_{jk}A_{kj}\,e^{i\omega_{jk}t}$$

Ker je $\chi_{BA}(t)$ kavzalna, ie. $\chi_{BA}(z)$ analitična na zgornji polravnini, $\chi'(\omega)$ in $\chi''(\omega)$ nista neodvisni!

<u>Kramers-Kronigova zveza</u>

def $\quad g(z)=\frac{\chi(z)}{z-u} \qquad \oint_C g(z)\,dz=0$



15.1.17

$$\oint_c g(z)dz = \int_{-\infty}^{\mu-\varepsilon} \frac{\chi(\omega)}{\omega-\mu}d\omega + \int_{\mu+\varepsilon}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-\mu}d\omega + \int_{\pi}^{0} \underbrace{d\varphi\, ire^{i\varphi}}_{d(re^{i\varphi})} \frac{\chi(\mu+re^{i\varphi})}{\mu+re^{i\varphi}-\mu} =$$

$$P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-\mu}d\omega \equiv \lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\mu-\varepsilon} \text{-}\shortparallel\text{-} + \int_{\mu+\varepsilon}^{\infty} \text{-}\shortparallel\text{-}$$: Cauchyeva glavna vrednost

$$\Rightarrow \quad P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-\mu}d\omega = -\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{\pi}^{0} i\,d\varphi\,\chi(\mu+re^{i\varphi}) = i\pi\chi(\mu)$$

$$\chi(\omega') = \frac{1}{\pi i}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-\omega'}d\omega$$

od tudi takoj dobimo:

Kramers-Kronig
$$\chi'(\omega') = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi''(\omega)}{\omega-\omega'}d\omega$$ posledica kavzalnosti

$$\chi''(\omega') = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi'(\omega)}{\omega-\omega'}d\omega$$ le ena je neodvisna

Če uporabimo zvezo $\lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{\omega\mp i\varepsilon} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega}\right) \pm i\pi\delta(\omega)$, lahko zapišemo

$$\chi(\omega') = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\frac{\chi''(\omega)}{\omega-\omega'-i\varepsilon}$$ $\left\{\chi(\omega) \text{ danes le z Im delom}\right\}$

← Fluktuacijsko - disipacijski izrek

+ disipacija: o $\chi''(\omega)$ je sorazmerna disipacija

Spomnimo, $H = H_0 - a(t) A$ (zunanje polje, npr.: $B, E, \ldots$)

$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] \Rightarrow tr((H\rho - \rho H)H) = 0$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} tr(\rho(t) H) = tr\left(\frac{d\rho}{dt} H\right) + tr\left(\rho(t)\frac{dH}{dt}\right) =$$

$$= -tr(\rho(t)\,\dot{a}(t) A) = \cancel{a\omega \sin\omega t \; tr(\rho(t) A)}$$

za $a(t) = \mathrm{Re}(a e^{-i\omega t}) = a\cos\omega t$

$$= a\omega \sin\omega t \cdot tr(\rho(t) A) = a\omega \sin\omega t \langle A(t)\rangle_a =$$

$$\frac{dE}{dt} = a^2\omega \sin\omega t \underbrace{\{\chi'_{AA}\cos\omega t + \chi''_{AA}\sin\omega t\}}_{\langle A(t)\rangle_a \text{ smo izpeljali}}$$

$$\overline{\frac{dE}{dt}}_{\text{čez periodo}} = \frac{1}{2} a^2 \omega \chi''_{AA}(\omega)$$

moč absorbirana v sistemu zaradi polja $a(t)$!

lahko izpeljemo tudi iz Fermijevega zlatega pravila $\sum_{m,2} \langle \psi_m | A | \psi_2\rangle \delta(\omega_{m2} - \omega)$

- možna eksperimentalna tehnika je merjenje absorbcije $\Rightarrow \chi'' \Rightarrow \chi$

- χ da linearni odziv - neravnovesno stvar
izpeljali smo, da se da χ zapisati tudi s korelacijskimi funkcijami - fluktuacije

$\Rightarrow$ F.-D. izrek

22.4.12

Izrazimo $\chi''(\omega)$ s korelacijskimi:

$$\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\,\Theta(t)\langle[B(t),A]\rangle$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_0^\infty \chi_{BA}(t)\,e^{i\omega t}\,e^{-\varepsilon t}\,dt$$

spektralna reprezentacija
$$\Theta(t) = \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\omega t}}{\omega+i\varepsilon}\,d\omega = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{i\omega t}}{\omega-i\varepsilon}\,d\omega$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{i}{\hbar}\int \Theta(t)\langle[B(t),A]\rangle\,e^{i\omega t}\,e^{-\varepsilon t}\,dt =$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0^+}\frac{i}{\hbar}\frac{i}{2\pi}\int\int d\omega'\,\frac{e^{-i\omega' t}}{\omega'+i\varepsilon}\langle[B(t),A]\rangle\,e^{i\omega t}\,e^{-\varepsilon t}\,dt =$$

$$\chi_{BA}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\int d\omega'\,\frac{1}{\omega'+i\varepsilon}\,\xi_{BA}(\omega-\omega') = +\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'\,\frac{\xi_{BA}(\omega')}{\omega'-\omega-i\varepsilon}$$

$$\left[\xi_{BA}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\hbar}\langle[B(t),A]\rangle\,e^{i\omega t}\,dt \quad \text{oz.} \quad \xi_{BA}(t) \equiv \frac{1}{2\hbar}\langle[B(t),A]\rangle\right] \text{ spektralna funkcija}$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi}\,\mathcal{P}\int d\omega'\,\frac{\xi_{BA}(\omega')}{\omega'-\omega} + \frac{1}{\pi}\int d\omega'\,\xi_{BA}(\omega')\,i\pi\,\delta(\omega'-\omega) =$$

$$= \underline{\frac{1}{\pi}\,\mathcal{P}\int d\omega'\,\frac{\xi_{BA}(\omega')}{\omega'-\omega}} + \underline{i\,\xi_{BA}(\omega)}$$

$$= \chi'_{BA}(\omega) + i\,\chi''_{BA}(\omega)$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'\,\frac{\xi_{BA}(\omega')}{\omega'-\omega-i\varepsilon}$$ primerjamo z izrazom pri K.-K. zvezi

$$\Rightarrow \underbrace{\xi_{BA}(\omega) = \chi''_{BA}(\omega)}$$

To zvezo bi lahko tudi dobili iz izraza za $\xi_{BA}(\omega)$ v lastni bazi. Ta je namreč

$$\xi_{BA}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar}\sum_{j,k}(p_j-p_k)\,B_{jk}A_{kj}\,\delta(\omega_{kj}-\omega)$$

 23.4.12

Imamo torej: χ'' je razlika dveh korelacijskih

$$\chi''_{BA}(\omega)= \frac{1}{2\hbar} \left(J_{BA}(\omega) - J_{AB} \right.$$

$$J_{BA}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle B(t) A \rangle \, dt$$

$\xi \propto B_t A - A B_t$;

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle A B(t) \rangle dt = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle A(-t) B \rangle dt = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \langle A(t) B \rangle dt = J_{AB}(-\omega)$$

$$\Downarrow$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} \left(J_{BA}(\omega) - J_{AB}(-\omega) \right)$$

$$J_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \, p_j \, e^{iE_j t} B_{jk} e^{-iE_k t} A_{kj} \, dt =$$

$$= \sum_{j,k} p_j B_{jk} A_{kj} \, \delta(\omega + \omega_{jk})$$

$$J_{AB}(-\omega) = J_{BA}(\omega) e^{-\beta\hbar\omega}$$

$$J_{AB}(-\omega) = \sum_{j,k} p_j A_{jk} B_{kj} \, \delta(-\omega + \omega_{jk}) =$$

$$= \sum_{j,k} p_k A_{kj} B_{jk} \, \delta(-\omega - \omega_{jk}) =$$

$$\omega + \frac{E_j - E_k}{\hbar} = 0$$

$$= \sum p_j A_{kj} B_{jk} \, \delta(\omega + \omega_{jk}) e^{-\beta\hbar\omega}$$

$$E_k = \omega + \frac{E_j}{\hbar}$$

$$p_k = p_j e^{-\beta\hbar\omega}$$

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right) \cdot \cancel{\langle B(t) A \rangle} J_{BA}(\omega)$$

Fluktuacijsko-disipacijski izrek (ena izmed oblik)

$$\chi''_{BA}(\omega) = \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle B(t) A \rangle \, dt$$

Klasična limita $\beta\hbar \to 0$ $\quad \chi''_{BA}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle B(t) A \rangle dt$

do sedaj smo $\chi''(\omega)$ povezali z $J_{BA}(\omega)\ \{\langle B_t A\rangle\}$, $\xi_{BA}(\omega)\ \{\langle [B_t, A]\rangle\}$, lahko pa tudi z "~~anti~~komutatorsko" korelacijsko. {v kvantni pač imamo različna urejanja}.

$$S_{BA}(t) \equiv \frac{1}{2}\langle B(t)A + AB(t)\rangle \quad \text{in} \quad S_{BA}(\omega) = \int e^{i\omega t} S_{BA}(t)\,dt$$

v lastni bazi je

$$S_{BA}(\omega) = \pi \sum_{j,k} (p_j + p_k)\, B_{jk} A_{kj}\, \delta(\omega_{kj} - \omega)$$

če to primerjamo z $\xi_{BA}(\omega)$, dobimo zvezo:

$$p_j - p_k = p_j + p_k \cdot \frac{p_j - p_k}{p_j + p_k} = (p_j + p_k)\frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega_{kj}}}{1 + e^{-\beta\hbar\omega_{kj}}}$$

v vsoti je $\omega_{kj} = \omega$ zaradi $\delta()$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar} S_{BA}(\omega) \cdot \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{1 + e^{-\beta\hbar\omega}} = \xi_{BA}(\omega)$$

$$\frac{1}{\hbar} S_{BA}(\omega)\cdot \mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2} = \xi_{BA}(\omega)$$

Imamo vrsto korelacijskih:

$$\xi_{BA}(t) = \frac{1}{2\hbar}\langle [B(t), A]\rangle \quad \text{spektralna f.}$$

$$S_{BA}(t) = \frac{1}{2}\langle \{B(t), A\}\rangle \quad \text{simetrična f.}$$

v klasični limiti op. komutirajo

$\Downarrow$

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

$$K_{BA}(t) = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle e^{\lambda H_0} A e^{-\lambda H_0} B(t)\rangle\, d\lambda \quad \text{kanonična (Kubova) kor.}$$

$K_{BA} = J_{BA} = S_{BA}$

in zveze:

$$\hbar\, \xi_{BA}(\omega)\cdot \mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) = S_{BA}(\omega)$$

$$\xi_{BA}(\omega) = \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{2\hbar} J_{BA}(\omega)$$

$$K_{BA}(\omega) = \frac{2}{\beta\omega}\cdot \xi_{BA}(\omega) \quad \leftarrow \text{spet v lastni bazi}$$

Z temi imamo alternativne F.-D.:

že prej:

$$\chi_{BA}(t) = \theta(t)\cdot\beta\cdot K_{B\dot{A}}(t)$$

po K.-K.:

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\pi}\int \frac{\xi_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon}\,d\omega' \leftarrow \chi''_{BA}(\omega) = \xi_{BA}(\omega),\quad \chi''_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\mathrm{th}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) S_{BA}(\omega)$$

29.4.12

Klasična limita: $\beta\hbar\omega \to 0$, ie, $\hbar \to 0$ ali $\beta \to 0$

$B(t)$ in A komutirata $\Rightarrow$ $S_{BA}(t) = J_{BA}(t)$

Kanonična korelacijska $K_{BA}(t) = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle e^{\lambda H_0} A e^{-\lambda H_0} B(t)\rangle d\lambda =$

$$= \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle A(-i\hbar\lambda)\, B(t)\rangle d\lambda = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle A\, B(t+i\hbar\lambda)\rangle d\lambda$$

$$\overset{\text{klasično}}{\Longrightarrow} \frac{1}{\beta}\beta \cdot \langle A B(t)\rangle = J_{BA}(t)$$

vse korelacijske so enake

Simetrije korelacijskih:

Npr. za $\xi_{BA}(t) = \frac{1}{2\hbar}\langle [B(t), A]\rangle = -\frac{1}{2\hbar}\langle [A(-t), B]\rangle$

$$\xi_{BA}(t) = -\xi_{AB}(-t)$$

$$\Downarrow$$

$$\xi_{BA}(\omega) = -\xi_{AB}(-\omega)$$

$\{\xi_{AA}(\omega)$ je liha funkcija ω.$\}$

$$\xi^{*}_{BA}(t) = \frac{1}{2\hbar}\langle e^{iH_0t} B e^{-iH_0t} A - A e^{iH_0t} B e^{-iH_0t}\rangle^{*} = \langle -A\, \cancel{e^{-iH_0t} B e^{iH_0t}} + \cancel{e^{-iH_0t} B e^{iH_0t}} A\rangle$$

$$= -\frac{1}{2\hbar}\langle [B(t), A]\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\xi^{*}_{BA}(\omega) = -\xi_{BA}(-\omega)$$

$\chi_{AA}(\omega=0)$:

Ker je $\xi_{AA}(\omega)$ liha, je tudi po F.-D. izreku $\chi''_{AA}(\omega)$ liha.

$\chi''_{AA}(\omega=0) = 0$,

$$\chi'_{AA}(\omega=0) = \text{po K.-K.} = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''_{AA}(\omega')}{\omega'} d\omega' \Rightarrow$$

29.4.12

⇓

$$\chi_{AA}(\omega=0) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta}{2} \cdot K_{AA}(\omega') d\omega' = \beta \cdot K_{AA}(t=0)$$

$$\chi''_{AA} = \frac{1}{2\hbar} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) J_{AA} = \xi_{AA}(\omega)$$

Primer - harmonski oscilator

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \hbar\omega_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right) \qquad [a, a^+] = 1$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (a + a^+)$$

$$p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} (i a^+ - i a)$$

$$H_1 = - x F(t)$$

zunanja sila

$$a(t) = a e^{-i\omega_0 t} \qquad a^+(t) = a^+ e^{i\omega_0 t}$$

linearni odziv:

$$\chi_{aa^+}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [a(t), a^+] \rangle = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) e^{-i\omega_0 t}, \quad \chi_{aa}(t) = \chi_{a^+a^+}(t) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \chi_{xx}(t) = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left(\chi_{aa^+}(t) + \chi_{a^+a}(t)\right) = \Theta(t) \frac{\sin\omega_0 t}{m\omega_0}$$

$$\chi_{xx}(\omega) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \int_0^{\infty} \chi_{xx}(t) e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} dt = \frac{1}{2m\omega_0} \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left(\frac{1}{\omega + \omega_0 + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\varepsilon} \right)$$

$$\mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega+\omega_0}\right) - i\pi\delta(\omega+\omega_0)$$

$$\chi'_{xx}(\omega) = \frac{1}{2m\omega_0} \left(\mathcal{P}\frac{1}{\omega+\omega_0} - \mathcal{P}\frac{1}{\omega-\omega_0} \right)$$

$$\chi''_{xx}(\omega) = \frac{\pi}{2m\omega_0} \left(\delta(\omega-\omega_0) - \delta(\omega+\omega_0) \right)$$

Korelacijske:

$$S_{xx}(t) = \frac{1}{2} \langle x x(t) + x(t) x \rangle = \frac{\hbar}{4m\omega_0} \left(S_{aa^+}(t) + S_{a^+a}(t) \right) = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \cos\omega_0 t \, \langle a a^+ + a^+ a \rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \operatorname{cth}\frac{\beta\hbar\omega_0}{2} \cos\omega_0 t \; ; \quad S_{xx}(0) = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0} \operatorname{cth}\frac{\beta\hbar\omega_0}{2} \to$$

klasično $kT/m\omega_0^2$ ekviparticija

25.4.12

$$S_{xx}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty} S_{xx}(t)\, e^{i\omega t}\, dt = \frac{\pi\hbar}{2m\omega_0}\, \mathrm{cth}\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\Big(\delta(\omega-\omega_0)+\delta(\omega+\omega_0)\Big) =$$

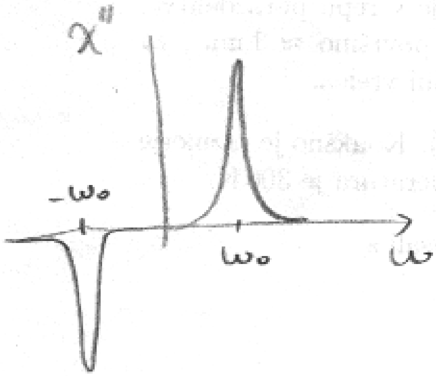
$$= \frac{\pi\hbar}{2m\omega_0}\, \mathrm{cth}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\Big(\delta(\omega-\omega_0)-\delta(\omega+\omega_0)\Big)$$

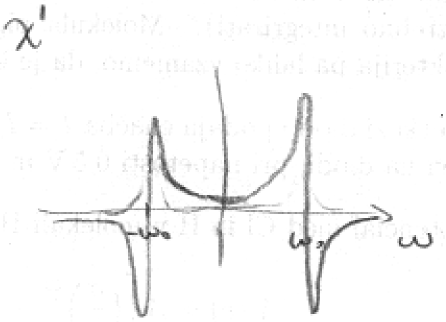
F.-D. izrek je sedaj $\qquad \chi''_{xx}(\omega)\, \hbar\, \mathrm{cth}\frac{\beta\hbar\omega}{2} = S_{xx}(\omega)$

Tak nedušen H.-O. seveda ni realističen – absorbira le pri $\pm\omega_0$. Kvantno bi lahko disipacijo dobili, če bi ta H.-O. sklopili z rezervoarjem H.O.. To je Caldeira-Leggettov model.

Klasično pa bi dodali le dušenje. Rezultat je, da se "črte" razširijo:

$$\chi_{xx}(\omega)=\frac{1}{m}\,\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-i\gamma\omega}$$





29.4.12

Električna prevodnost

homogen $\vec{E}$ $\qquad H_1 = -e\sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{E}(t)$

$\left\{ \right.$ za nehomogeno polje bi vzeli $H_1 = \int \phi(\vec{r},t)\rho(\vec{r})d\vec{r}$ ← potencial

tok: $\vec{j} = \frac{e}{V}\sum_i \vec{v}_i$

odvisnost toka $B = \vec{j}$

$$\langle \vec{j}_\alpha(t)\rangle_{E(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \underset{\chi_{BA}}{\underline{\chi}_{j\beta}}(t-t')\vec{E}_\beta(t')dt'$$

$\vec{B} = \vec{j}$

$\vec{A} = e\sum_i \vec{r}_i$

$$\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle[\vec{j}(t), e\sum_i \vec{r}_i]\rangle$$

$$= \Theta(t)\int_0^{\beta}\langle \dot{A}(-i\hbar\lambda)B(t)\rangle d\lambda = V\Theta(t)\int_0^{\beta}\langle j(-i\hbar\lambda)j(t)\rangle d\lambda$$

$$\dot{\vec{A}} = V\cdot\vec{j}$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = V\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_0^{\infty} dt\, e^{i\omega t}e^{-\varepsilon t}\int_0^{\beta}\langle j_\beta(-i\hbar\lambda)j_\alpha(t)\rangle d\lambda$$

Kubo-Nakano-va enačba.

tudi Green-Kubo

Gostota - tok: (Kubo) p. 172

gostota delcev $\quad n(\vec{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{k} n_k(t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

tok delcev $\quad j(\vec{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{k} j_k(t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div} j(\vec{r},t) = 0 \quad \text{a.} \quad \dot{n}_k + i\vec{k}\cdot\vec{j}_k = 0$$

$$H_1 = -\int n(\vec{r},t)\varphi(\vec{r},t)d\vec{r} = -\int n_{-k}(t)\varphi(k,t)d\vec{k}$$

← zunanji potencial

$$\left\{ \varphi(k) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\vec{k}\vec{r}}\varphi(\vec{r})d\vec{r}\right.$$

$$n(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\int d\vec{r}'\,\chi(\vec{r}-\vec{r}', t-t')\varphi(\vec{r}',t')$$

$$j(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\int d\vec{r}'\,\mu(\vec{r}-\vec{r}', t-t')\nabla\varphi(\vec{r}',t')$$

↑ mobilnost

$$\cancel{\chi(t,r) = \frac{i}{\hbar}\Theta(t)}\langle[n(\vec{r},t), n(0,0)]\rangle$$

$$\chi(t-t', r-r') = \frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')\langle[n(r,t), n(r',t')]\rangle$$

$$\mu(r-r', t-t') = \beta\, \Theta(t-t') \quad K_{j,\dot{m}}(t)$$

$$= \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle e^{\lambda H_0} \frac{\partial m(r',t')}{\partial t} e^{-\lambda H_0}\, j(r,t)\rangle d\lambda = \frac{1}{\beta}\langle \int_0^\beta [-\nabla j(r', t'-i\hbar\lambda)] \cdot j(r,t)\, d\lambda \rangle$$

$$=$$

$$\chi(q,\omega) = \frac{1}{V}\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t}\, \frac{i}{\hbar}\langle [m_q(t), m_{-q}(0)]\rangle \quad \leftarrow \text{skalar}$$

$$\mu(q,\omega) = \frac{1}{V}\beta \int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t}\, \frac{1}{\beta}\langle \int_0^\beta e^{\lambda H_0} j_{-q}(0) e^{-\lambda H_0}\, j_q(t)\, d\lambda \rangle \quad \leftarrow \text{tenzor 2. reda}$$

χ in μ nista neodvisna, ker ju poveže kontinuitetna

$$i\omega\, \chi(q,\omega) + \vec{q}\cdot \mu(q,\omega)\cdot \vec{q} = 0$$

13.5.12

Toplotna prevodnost

Malo "drugačna", ker mi "mehanske" narave ne vemo, kaj je H_1.

Pomagamo si z analogijo: $H_1 = -a(t)A$ samo zapisali $X_{BA}(t) = \hbar \cdot \theta(t) K_{B\dot{A}}(t)$

$$\dot{H}_1 \equiv \frac{1}{i\hbar}[H_1, H_0] = -a(t)\dot{A}$$

torej lahko iz oblike $\dot{H}_1$ preberemo spremenljivko $\dot{A}$, ki nastopa v Kubovi korelacijski!

Npr.: nehomogeno polje

zunanji potencial

$$H_1 = -\int \varphi(\vec{r},t)\,\rho(\vec{r})\,d\vec{r}$$

gostota delcev

$$\dot{H}_1 = \int \varphi(\vec{r},t)\,\dot{\rho}(\vec{r})\,d\vec{r} = -\int \varphi(\vec{r},t)\,\nabla\vec{j}(\vec{r})\,d\vec{r} =$$

$$\dot{\rho}(\vec{r}) + \mathrm{div}\,\vec{j}(\vec{r}) = 0$$

$$\overset{\text{per partes}}{=} -\int \nabla\varphi(\vec{r},t)\,\vec{j}(\vec{r})\,d\vec{r} =$$

$$\dot{H}_1 = -\int \vec{E}(\vec{r},t)\,\vec{j}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

kot produkcija entropije = tok · (driving field)

tok, afiniteta

$$\{ j = L\nabla\gamma \}$$

$$\sigma_s = j\cdot\tilde{F} = j\cdot\nabla\gamma = \frac{1}{T}\cdot\vec{E}(r,t)\cdot\vec{j}(\vec{r})$$

$$\dot{H}_1 = -T\int \sigma_s\,d\vec{r}$$

Pri toplotnem prevajanju bo $\sigma_s = j_Q \cdot \nabla\left(\frac{1}{T}\right)$

torej po analogiji $\dot{H}_1 = -T\int \vec{j}_Q\cdot\nabla\left(\frac{1}{T}\right)d\vec{r}$

{ da je to dejansko produkcija entropije se da utemeljiti bolj "rigorozno". Pottier p. 403 }

 13.5.12

operator ~~opremenljivka~~ sistema $\hat{A}(r,t) \equiv \vec{j}_Q$, "zunanje polje" $a(t) = T\nabla\left(\frac{1}{T}\right) = -\frac{\nabla T}{T}$

Če nas zanima tok od časa v smeri "α", imamo Kubovo enačbo

$$\langle j_{Q\alpha}(t)\rangle = -\frac{1}{T}\int d\vec{r}\,'\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{BA}(t-t')\,\nabla_\gamma T(r',t')\,dt' \leftarrow \text{L.-R. za nehomogen sistem}$$

$$= -\frac{1}{T}\int d\vec{r}\,'\int_{-\infty}^{t}dt'\int_0^\beta \langle j_{Q\gamma}(\vec{r}\,',-i\hbar\lambda)\,j_{Q\alpha}(\vec{r},t-t')\rangle\,\nabla_\gamma T(\vec{r}\,',t')\,d\lambda$$

v Fourierovi sliki imamo

$$\langle j_{Q\alpha}(q,\omega)\rangle = -K_{\alpha\gamma}(q,\omega)\,\nabla_\gamma T(q,\omega)$$

$$K_{\alpha\gamma}(q,\omega) = \frac{1}{VT}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_0^\infty dt\,e^{i\omega t}e^{-\varepsilon t}\int_0^\beta\langle j_{Q\gamma}(-q,-i\hbar\lambda)\,j_{Q\alpha}(q,t)\rangle\,d\lambda$$

v izotropni snovi in klasični limiti imamo

$$K(q,\omega) = \frac{1}{kT^2V}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_0^\infty e^{i\omega t}e^{-i\varepsilon t}\langle j_Q(-q,0)\,j_Q(q,t)\rangle\,dt$$

Stohastični procesi - Brownovo gibanje

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma\frac{dx}{dt} + F(t)$$

$\uparrow$ upor $\uparrow$ fluktuacijska sila   : oba iz istega vira 

(=> kot bomo videli, sta povezana)

Langevinova enačba:

$$m\frac{dv}{dt} = -m\gamma v + F(t)$$

$$\langle F(t)\rangle = 0$$

Stohastična DE: (Itô) lema: $df(v) = f'dv + \frac{1}{2}f''...$ odvod funkcije stoh. spremenljivke

$$\langle F(t+\tau)F(t)\rangle = 2Dm^2\delta(\tau)$$

$\Downarrow$

numerično

$$v(t+\Delta t) = v(t) - \gamma v(t)\Delta t + \tilde{F}\Delta t$$

diskretizat: $\langle\tilde{F}^2\rangle = \frac{2Dm^2}{\Delta t}$ $\left\{\begin{matrix}\text{enota } \delta(\tau)\to \\ \frac{1}{t}\end{matrix}\right\}$ naključna št. $\langle\xi^2\rangle$, $\sigma=1$

$$v(t+\Delta t) - v(t) = -\gamma v\Delta t + \sqrt{2D}\sqrt{\Delta t}\cdot\xi$$

- Fourierovat. avtokorelacije da spekter šuma => bel šum

- korelacijski čas šuma $\to 0$

Langevinova enačba velja na časovni skali $\Delta t \gg t_{coll.}$ (trki molekul)

tudi $\Delta t \gg \tau_c$ (korelacije sile)

in $\Delta t \ll \frac{1}{\gamma}$

ena realizacija

Rešitev je $\neq$ $v(t) = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} F(\tau)e^{-(t-\tau)\gamma}d\tau$, kot linearni odziv

povprečje $\langle v(t)\rangle = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)}$ "spomin delca" $\sim\frac{1}{\gamma}$

$$\sigma_v^2(t) = \langle v^2(t)\rangle - \langle v(t)\rangle^2 = \frac{1}{m^2}\int_{t_0}^{t}d\tau_1\int_{t_0}^{t}d\tau_2\langle F(\tau_1)F(\tau_2)\rangle e^{-\gamma(t-\tau_1)}e^{-\gamma(t-\tau_2)}$$

za δ - korelacijo

$\Downarrow$

$$\sigma_v^2(t) = 2D\int_{t_0}^{t} e^{-2\gamma(t-\tau)}\,d\tau = \frac{D}{\gamma}\left(1-e^{-2\gamma(t-t_0)}\right)$$

za $t \ll \frac{1}{\gamma}$ $\quad \sigma_v^2(t) \simeq 2D\,(t-t_0)$

difuzijska konst. hitrosti

za $t \gg \frac{1}{\gamma}$ pa $\quad \sigma_v^2(t) = \frac{D}{\gamma}$

precej "izjemno": fluct. odvisne le od T, ne pa npr. od gostote. Vplina neodvisno od tlaka!

p = 1bar

manjši p

Torej $\left\langle \frac{m v^2}{2} \right\rangle = \frac{m D}{2\gamma} = \frac{kT}{2}$ (po ekviparticiji, ki je odvisna pa T)

$\Downarrow$

$$\gamma = \frac{m D}{kT}$$

oz. $$\gamma = \frac{1}{2mkT}\int_{-\infty}^{\infty} \langle F(t)\,F(t+\tau)\rangle\, d\tau$$

kot fluktuacijski-disipacijski izrek

Za $x(t)$ je treba integrirati $v(t)$

$$x(t) = x_0 + \frac{v_0}{\gamma}\left(1-e^{-\gamma(t-t_0)}\right) + \frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} \frac{1-e^{-\gamma(t-\tau)}}{\gamma}\,F(\tau)\,d\tau$$

$$\langle x(t)\rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma}\left(1-e^{-\gamma t}\right)$$

$$\langle x^2(t)\rangle - \langle x(t)\rangle^2 = \sigma_x^2(t) = \dots = \frac{2D}{\gamma^2}\left(t-t_0 - 2\,\frac{1-e^{-\gamma(t-t_0)}}{\gamma} + \frac{1-e^{-2\gamma(t-t_0)}}{2\gamma}\right)$$

za $t \ll \frac{1}{\gamma}$ $\quad \sigma_x^2(t) \simeq \frac{2Dt^3}{3}$ $\quad \left\{ \sigma_v^2 \sim t \Rightarrow v \sim t^{1/2} \Rightarrow x \sim t^{3/2} \right\}$

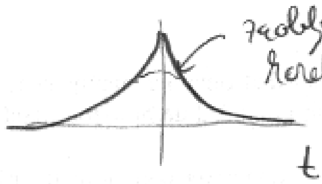
$t \gg \frac{1}{\gamma}$ $\quad \sigma_x^2(t) \simeq \frac{2Dt}{\gamma^2}$ $\quad$ difuzija le za dolge čase. Za male drugače (vztrajnost)

Poseb.

$$\langle [x(t)-x_0]^2\rangle = \sigma_x^2(t) + \frac{v_0^2}{\gamma^2}\left(1-e^{-\gamma(t-t_0)}\right)^2$$

korelacijska hitrosti pa je

$$\lim_{t'\to\infty} \langle v(t'+t)v(t')\rangle = \frac{D}{\gamma} e^{-\gamma|t|} \qquad t-t'$$



zaobljen špic za končni korelac. čas F.

Ker je enačba linearna, lahko v Fourierovi sliki

$$v(\omega) = \frac{1}{m}\frac{1}{\gamma - i\omega}F(\omega) \qquad v, F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\, e^{i\omega t}\, dt$$

spektralne gostote $S \propto |v(\omega)|^2$ pa

$$S_v(\omega) = \frac{1}{m^2}\frac{1}{\gamma^2+\omega^2}S_F(\omega)$$

disipacija γ nam vsako črto v $F(\omega)$ razširi v Lorentzovo obliko

Do zdaj smo izračunali $\langle v\rangle$ in $\langle v^2\rangle$. Kaj pa višji momenti? Ali pa kar cela porazdelitev. Za to potrebujemo tudi višje korelacije $F(t)$.

Najenostavnejši je primer, ko je $F(t)$ gaussovski stohastični proces.

Kaj je gaussovski stohastični proces?

imejmo spremenljivko F ob diskretnih časih, $F_i = F(t_i)$

$F(t)$ je gaussovski, če je $\vec{x} = (F_1, F_2, \ldots, F_n)$ naključno gaussovsko število. Torej

$$P(\vec{x}) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{ij=1}^{n} A_{ij}(x_i-m_i)(x_j-m_j)\right)$$

$m_i = \langle x_i \rangle$ povprečne vrednosti

Vse momente lahko enostavno dobimo iz karakteristične funkcije:

$$\phi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n) \equiv \int P(\vec{x})\, d\vec{x}\, e^{i\sum_{j=1}^{n} \xi_j x_j}$$

20.5.12

Če naredimo Gaussovski integral, dobimo

$$\phi(\vec{\xi}) = \exp\left(i\sum \xi_j m_j - \frac{1}{2}\sum_{jk} \xi_j (A^{-1})_{jk}\, \xi_k\right)$$

poljuben moment iz $\displaystyle \phi(\vec{\xi}) = \sum \frac{(i\xi_1)^{r_1} \cdots (i\xi_n)^{r_n}}{r_1! \cdots r_n!} \langle x_1^{r_1} \cdots x_n^{r_n} \rangle$

kumulante pa dobimo iz razvoja $\ln \phi(\xi)$.

Gaussovski proces ima očitno $\neq 0$ samo 1. in drugi kumulant.

$$\langle (x_i - m_i)(x_j - m_j) \rangle = g(t_i, t_j) = [A^{-1}]_{ij}$$

korelacijska funkcija

n-točkovne korelacije najlažje dobimo po Wicku

$$\langle x(t_1) \cdots x(t_n) \rangle = \sum_{\text{sparitvah}} \prod g(t_j, t_k) \qquad (\text{če je } m_j \equiv 0)$$

Za zvezni proces imamo očitno posplošitev: karakteristični funkcional

$$\phi[\xi(t)] = \left\langle e^{i\int \xi(t) F(t)\, dt} \right\rangle \overset{\text{gaussovski}}{=} \exp\left(i\int \xi(t) m(t)\, dt - \frac{1}{2}\iint g(t,t')\, \xi(t)\, \xi(t') \right)$$

- Če je $F(t)$ stacionaren $\Rightarrow$ $m(t) = m$ in $g(t_1, t_2) = g(t_1 - t_2)$
- Vsota Gaussovskih stohastičnih je spet Gaussovski stohastični. Vsaka linearna transformacija $F(t)$ je Gaussovska. $\Rightarrow$ linearna DE z Gaussovskim $F(t)$ ima za rešitev Gaussovski stoh. proces.

20.5.12

Master enačba za porazdelitev hitrosti $f(v,t)$ – Fokker–Planckova enačba:

Gaussovski $F(t)$ in δ-korelacije v času.
(predpostavka; odvisnost od višjih korelacij)

$\Downarrow$

{v splošnem je Gaussovski tudi Markovski, če je $g(t)$ eksponentna} Pottier 118

$v(t)$ je tudi Markovski proces

$$P(v_3,t_3|v_1,t_1) = \int P(v_2t_2|v_1t_1)\,P(v_3t_3|v_2t_2)\,dv_2 \qquad t_1<t_2<t_3$$

pravilo kompozicije = en. Chapman-Kolmogorova oz. Smoluchowskega (delal PhD pri Stefanu)

Poiščimo DE za $f(v,t)$:

$$f(v,t+dt) = \int f(v-w,t)\,p(v-w;w;dt)\,dw$$

gostota verjetnosti za skok w v času dt iz $v-w$

$$f(v-w,t)\,p(v-w;w;dt) = \text{razvijemo } p \text{ v členu } v-w = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{r!} w^r \frac{\partial^r}{\partial v^r}\left[f(v,t)\,p(v,w,dt)\right]$$

$$f(v,t+dt) = \int dw \sum_r \frac{(-1)^r}{r!} w^r \frac{\partial^r}{\partial v^r}\left[f(v,t)\,p(v;w;dt)\right] = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{r!}\frac{\partial^r}{\partial v^r}\left[\langle w^r\rangle f(v,t)\right]$$

$$\int dw\, w^r p(v;w;dt) = \langle w^r\rangle \equiv M_r\,dt$$

$$f(v,t+dt)-f(v,t) \longrightarrow \frac{\partial f(v,t)}{\partial t} = \sum_{r=1}^{\infty}\frac{(-1)^r}{r!}\frac{\partial^r}{\partial v^r}\left[M_r f(v,t)\right]$$

Kakšni so M_r za našo Langevinovo enačbo in Gaussovski $F(t)$?

$$w = -\gamma\int v\,dt' + \frac{1}{m}\int F(t')\,dt' \quad\Rightarrow\quad w \text{ je Gaussovski stoh. proces,}$$

torej $p(v;w;dt)$ je Gaussovska

$\langle w \rangle = -\gamma v\, dt + \mathcal{O}(dt^2)$ $\qquad M_1 = -\gamma \cdot v$

$\langle w^2 \rangle =$ nekaj računanja (enako, kot za v^2) $= 2D\, dt + \mathcal{O}(dt^2)$

$$M_2 = 2D$$

$$p(v; w; dt) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D dt}} \exp\left(-\frac{(w + \gamma v dt)^2}{4 D dt}\right)$$

višji momenti so reda dt^3 ali več $\Rightarrow M_{r>2} \to 0$

Torej:

$$\frac{\partial f(v,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v}\left[\gamma v f(v,t)\right] + \frac{\partial^2}{\partial v^2}\left[D f(v,t)\right]$$

Fokker - Planck

evolucijska za gostoto Markovskega procesa kadar so $M_{r\geq 3} = 0$.

stacionarna rešitev $\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \Rightarrow \gamma v f + D \frac{\partial}{\partial v} f = \text{konst.}$

če je konst. $\neq 0$ ni normalizabilna $\left\{ v \to \infty : \gamma v f = \text{konst.},\ f \sim \frac{1}{v} \right\}$

$$\gamma v f + D f' = 0 \Rightarrow f \sim \exp\left(-\frac{\gamma v^2}{2D}\right)$$

ala Maxwellova porazdelitev

20.5.12

Fluktuacijski izrek

ravnovesna količina

nam podajo zvezo oblike $p_F(x) = p_R(-x)\ \exp\left(a(x-b)\right)$

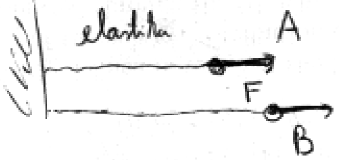
verjetnost za x pri poljubnem neravnovesnem protokolu

Povežejo torej neko količino izven ravnovesja z pričakovanimi vrednostmi v ravnovesju. ~~Npr~~ Dajo verjetnost za fluktuacijo velikosti $x \Rightarrow$ zato ime fluktuacijski izrek. Na nek način se tudi "poplošči" II. zakon TD.

So posledica reverzibilnosti mikroskopskih enačb.

Prvi začetki v 70, potem pa v '90. (Evans, Cohen, Morriss '93) Crooks '99, Jarzynski '97, in veliko drugih. Posebej so uporabni za mezo- in mikro- sisteme, kjer fluktuacije niso ~~majhne~~ zanemarljive.

Primer



raztegnemo

dejanski eksperimenti z raztegovanjem RNK z optično pinceto in pipeto.

~~elastika~~ za elastiko lahko zapišemo I. zakon

$$dU = đW + đQ$$

, če npr. elastiko raztegnemo iz

$A \to B$ (poljubno hitro)

II. zakon pravi, da $\exists$ funkcija stanja $\displaystyle\int_A^B \frac{đQ}{T} \leq S_B - S_A = \Delta S$

 20.5.12

Enakost velja za zelo počasne reverzibilne spremembe.

Naj bo do $t=0$ sistem v A termaliziran

po času $t=T$ v B počakamo, da se temperature ponovno izenačijo.

(to sicer ni potrebno, ker se med tem delo ne spremeni; pač pa velja tudi, če si samo dobljen z rezervoarjem)

$$W = \Delta U - \delta Q \geq \Delta U - T\Delta S = \Delta F$$

pri $T=$konst.

$$W \geq \Delta F = F_B - F_A$$

ravnovesna

$$\left\{\begin{array}{l} \text{včasih pišemo } W_{rev} \equiv \Delta F \\ W \equiv W_{rev} + W_{dis}\text{, torej} \\ W_{dis} \geq 0 \quad (\text{II. zakon TD}) \end{array}\right\}$$

delo, ki ga moramo vložiti za spremembo $A \to B$ je vsaj ΔF med ravnovesnima stanjema.

(malo drugače zapisan II. zakon: delo za $A \to B \geq$ delo v reverzibilnem primeru)

Za <u>ciklične spremembe</u>

$$A \underset{R}{\overset{F}{\rightleftarrows}} B$$

F: v "forward" smeri začnemo z termičnim v A

R: v "~~backward~~ reversed" pa z termičnim v B, vsi ostali parametri $\lambda(t)$ pa gredo v obratni smeri

$W_F \geq \Delta F$

$W_R \geq -\Delta F$ oz. $-W_R \leq \Delta F$

$$W_F + W_B \geq \Delta F - \Delta F = 0$$

jasno

$$-W_R \leq \Delta F \leq W_F$$

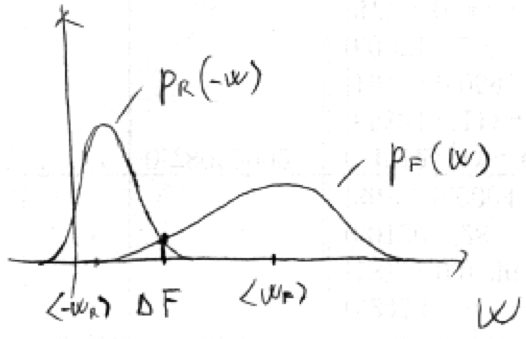
tole velja povprečno za termično populacijo (po velikih poskusih)

$$\langle -W_R \rangle \leq \Delta F \leq \langle W_F \rangle$$

Kaj pa sama verjetnostna porazdelitev $W_{F,R}$, če tak eksperiment ponavljamo?

Dobili bi $p_F(W)$ in $p_R(W)$

dovolj blizu ravnovesja so te porazdelitve Gaussove



Rišemo $P_R(-w)$, ker je W_R pretežno negativen, a po | | manjši od W_F

Sekata se pri ΔF (eq.) $\equiv$ fluktuacijski izrek

Izpeljimo fluktuacijski izrek (tudi za Hamiltonske sist. brez rezervoarjev, velja pa tudi z):

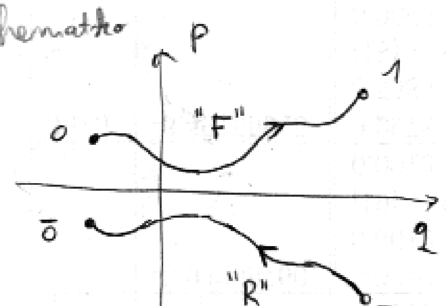
$H(t;B)$ časovno odvisen zaradi parametrov, in še po možnosti od $\vec{B}$.

Zanimali nas bosta dve evoluciji: "F" - napej: od $0 \to 1$

"R" - časovno obrnjena nazaj: $\bar{1} \to \bar{0}$

↑ časovno obrnjena stanja

shematsko



$H(0;B) \equiv H_0$, $H(1;B) \equiv H_1$

časovno obrnjen: $T H_0 T^{-1} = H(0;-B) \equiv H_{\bar{0}}$

$T H_1 T^{-1} = H_{\bar{1}} = H(1;-B)$

$T H(t;B) T^{-1} = H(t;-B)$

- začnemo z kanoničnim začetnim stanjem H_0 za "F" in $H_{\bar{1}}$ za "R".
- ob $t=0$ pomerimo energijo, kolikor je sistem v lastnem stanju $\Psi_m(t_0)$ z $E_m(0)$
- ob $t=T$ (stanje "1") enako, torej bomo po meritvi v stanju $\Psi_m(t=T)$ z $E_m(1)$

dovedeno delo je $W = E_m(1) - E_m(0)$

21.5.12

Porazdelitev dela za "F" je:

$$U_F = \mathcal{T} e^{-i\int_0^T H(t;B)\,d\tau/\hbar}$$

$$U_R = \mathcal{T}^+ e^{-i\int_0^T H(\tau;-B)\,d\tau/\hbar}$$

$$P_F(W) = \sum_{n,m}' \delta\left(W - [E_m(1) - E_n(0)]\right) \left|\langle m(1)| U_F |n(0)\rangle\right|^2 \cdot \frac{e^{-\beta E_n(0)}}{Z_0}$$

Fourierova transformiranka $G_F(\omega) \equiv \int P_F(W)\, e^{i\omega W} dW$ je

$$G_F(\omega) = \sum_{n,m} e^{i\omega(E_m(1) - E_n(0))} \frac{e^{-\beta E_n(0)}}{Z_0} \langle m(1)| U_F |n(0)\rangle\langle n(0)| U_F^+ |m(1)\rangle$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{n,m}' \langle n(0)| U_F^+ e^{i\omega H_1} |m(1)\rangle\langle m(1)| U_F e^{-i(\omega - i\beta) H_0} |n(0)\rangle =$$

$$G_F(\omega) = \frac{1}{Z_0} \mathrm{tr}\left[U_F^+ e^{i\omega H_1} U_F e^{-(i\omega+\beta) H_0}\right]$$

sedaj bomo izračunali čas.- obrnjen izraz:

$$T U_F T^{-1} = T e^{-iH_1\Delta t} \cdots e^{-iH_0\Delta t} T^{-1} = e^{iH_{\bar{1}}\Delta t} \cdots e^{iH_{\bar{0}}\Delta t} = U_R^+$$

$$T U_F^+ T^{-1} = U_R$$

$$Z_0 G_F(\omega) = \mathrm{tr}\left[TT^{-1} U_F^+ TT^{-1} e^{i\omega H_1} TT^{-1} U_F TT^{-1} e^{-(i\omega+\beta)H_0} TT^{-1}\right] = \mathrm{tr}\left[T U_R e^{-i\omega H_{\bar{1}}} U_R^+ e^{-(-i\omega+\beta) H_{\bar{0}}} T^{-1}\right]$$

$\{\mathrm{tr}\, T B T^{-1} = \mathrm{tr}\, B^+\}$

$$= \mathrm{tr}\left[e^{(-i\omega-\beta) H_{\bar{0}}} U_R e^{i\omega H_{\bar{1}}} U_R^+\right] = \mathrm{tr}\left[U_R^+ e^{i(-\omega+i\beta) H_{\bar{0}}} U_R e^{i\omega H_{\bar{1}}}\right]$$

$$Z_0 G_F(\omega) = Z_{\bar{1}} G_R(-\omega + i\beta)$$

H sedaj funkcija $\vec{B}$ in ne $\vec{B}$

ker je $Z_0 = e^{-\beta F_0}$ in $Z_{\bar{1}} = e^{-\beta F_{\bar{1}}} = e^{-\beta F_1}$, je

$$G_F(\omega) = e^{-\beta \Delta F} G_R(-\omega + i\beta)$$

, $\Delta F \equiv F_1 - F_0$ (sicer $F_{\bar{1}} - F_0$)

ravnovesni razliki!

21.5.12

Če sedaj naredimo obratno Fourierovo, dobimo

$$p_F(W) = e^{-\beta\Delta F}\frac{1}{2\pi}\int e^{-i\omega W} G_R(-\omega+i\beta)\,d\omega$$

$$= e^{-\beta\Delta F}\frac{1}{2\pi}\int e^{i\mu W} e^{\beta W} G_R(\mu)\,d\mu =$$

$$p_F(W) = e^{\beta(W-\Delta F)}\, p_R(-W)$$

$$\frac{p_F(W)}{p_R(-W)} = e^{\beta(W-\Delta F)}$$

(Tasaki)-Crooksov fluktuacijski izrek

neravnovesna količina (T poljuben)

ravnovesni ~~[illegible]~~ ΔF

Velja v mnogih situacijah: stohastični markovski procesi, klasično, sklopljeno z T rezervoarji, ...

Enakost Jarzynskega:

iz $\int p_F(W)\, e^{-\beta W} dW = \int p_R(-W)\, e^{-\beta\Delta F} dW$

dobimo takoj

$$\boxed{\langle e^{-\beta W}\rangle = e^{-\beta\Delta F}} \quad \text{Jarzynski}$$

neravnovesno povprečje dela je enako ravnovesni ΔF.

- Se lahko uporabi za eksperimentalno merjenje Helmholtzove proste energije F!
- Pozor: protokol $0\to1$ je tak, da po času T sistem v 1 ni v ravnovesju!

- Če uporabimo Jensen-ovo neenakost, ki velja za konvexne funkcije f:

$$\langle f(g(x))\rangle \geq f(\langle g(x)\rangle) \qquad , g \text{ poljubna.}$$

za verjetnost.

$$\langle f(x)\rangle \geq f(\langle x\rangle)$$

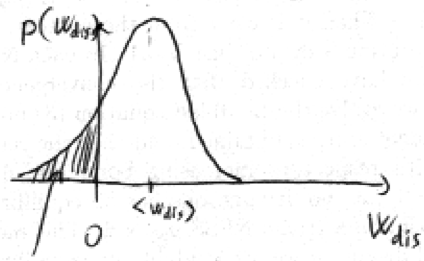
$$e^{-\beta\Delta F} = \langle e^{-\beta W}\rangle \geq e^{-\beta\langle W\rangle}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle W\rangle \geq \Delta F \qquad (\text{II. zakon TD})$$

Lahko bi tudi $W \equiv W_{rev} + W_{dis} = \Delta F + W_{dis} \Rightarrow \langle e^{-\beta W_{dis}}\rangle = 1$

-



$W = \Delta F + W_{dis}$

kršitve II. zakona
$W_{dis} < 0$

$$\mathrm{prob}(W \leq \Delta F - mk_0T) = \mathrm{prob}(-W_{dis} \geq mk_0T) = \int_{-\infty}^{\Delta F - mkT} P_F(W)\,dW \leq \int_{-\infty}^{\Delta F - mkT} P_F(W)\, e^{\beta(\Delta F - mkT - W)}\,dW$$

$$= e^{\beta(\Delta F - mkT)} \int_{-\infty}^{\Delta F - mkT} P_F(W)\, e^{-\beta W}\,dW$$

$$\leq e^{-m} \cdot e^{\beta\Delta F} \int_{-\infty}^{\infty} P_F(W)\, e^{-\beta W}\,dW$$

$$\mathrm{prob}(-W_{dis} \geq mkT) \leq e^{-m}$$

kršitve II. zakona so eksponentno redke v "kršitvi"

Posledica je, da lahko z veliko gotovostjo "ugotovimo" smer časa za makroskopske dogodke iz W_{dis}. Če je $W > \Delta F$ je naprej, sicer pa nazaj. ("film")

Analogne izraze Crooksovi enakosti sedaj izpeljati tudi za neravnovesna stacionarna stanja.

Če je $\sigma_s^{(\tau)}$ produkcija entropije čez čas τ, potem v $\tau \to \infty$ velja

$$\frac{p(\sigma_s^{(\tau)})}{p(-\sigma_s^{(\tau)})} \simeq e^{\tau \sigma_s^{(\tau)}}$$

ali npr.

verjetnost, da jih v t preteče n

$$\frac{P_t(n)}{P_t(-n)} \simeq e^{\beta n \cdot \Delta\mu}$$

(transport elektronov)

Sistemi daleč od ravnovesja

Precej manj "razvito" področje kot ravnovesna fizika.

Logično, saj je mnogo "stanj" večih (vse kar ni ravnovesno). Ni. neke enotne teorije neravnovesnih stanj: v stilu ravnovesne, kjer več v principu lahko izračunati pričakovane vrednosti.

Potrebno se je omejiti na podrazred neravnovesnih, npr. stacionarna (NESS)

Veliko novih zanimivih pojavov (fazni prehodi - neravnovesni), sicer pa so neravnovesna stanja, torej tudi z teorij, zanimiva in pomembna.

Predvsem so študirani klasični stohastični sistemi, ker so najenostavnejši.
stohastični so npr. enostavnejši kot koherentni (Hamiltonski) ker npr. ni problemov z ergodičnostjo, naravo dinamike, ...

Kvantni NESS je v povojih; le zadnjih nekaj let.

En način zapisa stoh. (klasičnih) modelov je master enačba:
(sistem z diskretnim faznim prostorom)

$$\frac{dP_c}{dt} = -\sum_{c'} w_{c\to c'} P_c + \sum_{c'} w_{c'\to c} P_{c'}$$

$$\sum_c P_c = 1$$

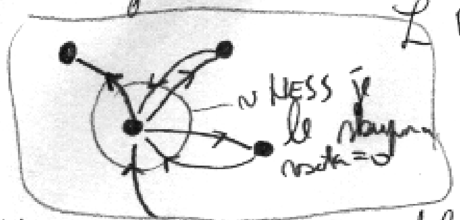
P_c = verjetnost, da smo v stanju c.

Linearna enačba $\frac{dP_c}{dt} = \mathcal{L} P_c$

↳ Liouvillov operator (nehermitski)

$$P_c(t) = e^{\mathcal{L}t} P_c(0)$$

NESS je rešitev

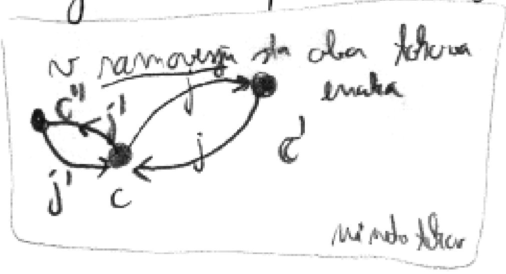


$\mathcal{L} P_c^{NESS} = 0$ lastni vektor $\mathcal{L}$ z lastno vrednostjo 0.

V primeru ravnovesnega stoh. procesa, velja

$$\frac{w_{c\to c'}}{w_{c'\to c}} = \frac{P_{c'}(eq)}{P_c(eq)}$$

(ala Metropolisov algoritem)



princip detajlnega ravnovesja.

Za neravnovesni sistem pa ni tega dodatnega pogoja. Poiskati NESS je **težko**, ker ni nekega splošnega minimizacijskega principa (npr: min F).

Zanimivi pojavi, npr: fazni prehodi, so pogosto posledica interakcij.

Najpreprostejši tip interakcije je t.i. "hard-core" odboj – dva delca ne moreta biti na istem mestu.

↓

to nas privede do klasičnih izključitvenih modelov:

mreža, npr. 1d

Mesto je prazno, ali pa zasedeno z enim delcem.
Ti nato naključno skačejo na (sosednja) mesta, če so ta prazna. Na robu lahko imamo še črpanje – skakanje v ali iz rezervoarja.

Če imamo več vrst delcev, ti med sabo lahko tudi reagirajo, npr:

$A + A \to \emptyset$ anihilacija
$A + A \to A$ koagulacija
$A + B \to A$
$\vdots$

so to "reaction-diffusion" modeli

Vsi ti razni stohastični modeli imajo poleg "tega" vrednosti tudi dejanske uporabe: promet, rast populacij, absorbcije, izparevanje, ...

Kvantni sistemi

- Najbolj splošna formulacija izvedenj je Hamiltonka $H = H_S + H_E + H_{SE}$.

nas pravzaprav zanima le dinamika "S".

induciram dinamiko $\rho_S(0) = \mathrm{tr}_E\,\rho(0) \rightarrow \rho_S(t) = \mathrm{tr}_E\,\rho(t)$

je težko obravnavati, ker imamo lahko "E" v principu neskončno velik.

- preslikava $\rho_S(0) \rightarrow \rho_S(t)$ je linearna, ohranja sled, in $\rho \geq 0$

pozitivna: ohranja pozitivnost $\Lambda \geq 0 \Leftrightarrow \forall \rho \geq 0 \quad \Lambda(\rho) \geq 0$

$$\rho_S(t) = \Lambda^{(t)}(\rho_S(0))$$

trace-preserving CPM (completely positive map)

$\boxed{\text{tudi } (\Lambda \otimes \mathbb{1}) \geq 0}$ razširitev

Klasifikacija CPM preslikav je odprt matematični problem.

- ~~Če kvant~~ Če je čas zvezen in je $\Lambda^{(t)}$ polgrupa v "t",

$$\Lambda^{(t)}\Lambda^{(t')} = \Lambda^{(t+t')}$$

potem se da enostavneje. Vsako tako evolucijo lahko zapišemo kot rešitev DE,

$$\frac{d\rho}{dt} = i[\rho, H] + \frac{1}{2}\sum_{\alpha}^{N^2-1} [L_\alpha \rho, L_\alpha^+] + [L_\alpha, \rho L_\alpha^+]$$

$$\left(+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha\ell} a_{\alpha\ell}[L_\alpha \rho, L_\ell^+] + [L_\alpha, \rho L_\ell^+] \right)$$

$H = H^+$

(Lindblad (Gorini, Kossakowski, Sudarshan))

$a_{\alpha\ell} > 0 \qquad L_\alpha$ ortogonalna baza (brezsledna)

Ta Lindbladova enačba je "najenostavnejši" primer kvantne master enačbe. Včasih se jo da tudi rigorozno izpeljati iz H ob določenih predpostavkah. Zaradi "polgrupne" lastnosti nam predstavlja Markovski proces — ni spomina.