



Задачи 12-13

Уравнение Ланжевена ($m=1$)

$$\ddot{x} + \nu \dot{x} = f(t)$$

ν – сила трения

$f(t)$ – случайная сила

Нас интересует коррелятор

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) (\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle$$

Усреднение понимается так:

$$\langle \dots \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \dots), \quad \hat{\rho} = \frac{\exp(-\hat{H} / T)}{Z}, \quad Z = \text{tr}(\exp(-\hat{H} / T)).$$

Раскроем скобки

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = \langle \hat{x}(t)\hat{x}(t) + \hat{x}(0)\hat{x}(0) - \hat{x}(0)\hat{x}(t) - \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle$$

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = 2\langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle$$

Здесь $\hbar = 1$

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0) e^{-i\hat{H}t},$$

$$\hat{x}(t)\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0) e^{-i\hat{H}t} = e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0)\hat{x}(0) e^{-i\hat{H}t},$$

$$\langle \hat{x}(t)\hat{x}(t) \rangle = Z^{-1} \text{tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0)\hat{x}(0) e^{-i\hat{H}t} \right) =$$

$$= Z^{-1} \text{tr} \left(e^{-i\hat{H}t} e^{-\beta\hat{H}} e^{i\hat{H}t} \hat{x}(0)\hat{x}(0) \right) = Z^{-1} \text{tr} \left(e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} e^{-\beta\hat{H}} \hat{x}(0)\hat{x}(0) \right) =$$

$$= Z^{-1} \text{tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \hat{x}(0)\hat{x}(0) \right) = \langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle = \langle \hat{x}^2(0) \rangle$$

Раскроем скобки

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = 2\langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle$$

Вывод:

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle \neq \langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))^2 \rangle$$

Введем обозначение
для корреляционных функций
двух операторов
(в представлении гейзенберга):

$$G_{AB}^K(t, t') = -i \left\langle \{ A(t), B(t') \}_+ \right\rangle,$$

$$G_{AB}^r(t, t') = -i \theta(t - t') \left\langle [A(t), B(t')]_- \right\rangle = \left\langle \left\langle A(t) \mid B(t') \right\rangle \right\rangle.$$

Введем обозначение
для корреляционных функций
двух операторов
(в представлении гейзенберга):

$$G_{AB}^K(t, t') = -i \left\langle \{ A(t), B(t') \}_+ \right\rangle,$$

$$G_{AB}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle [A(t), B(t')]_- \right\rangle = \left\langle \left\langle A(t) \mid B(t') \right\rangle \right\rangle.$$

При усреднении по равновесной матрице плотности:

$$G_{AB}^K(t - t') = -i \left\langle \{ A(t), B(t') \}_+ \right\rangle,$$

$$G_{AB}^r(t - t') = -i\theta(t - t') \left\langle [A(t), B(t')]_- \right\rangle = \left\langle \left\langle A(t) \mid B(t') \right\rangle \right\rangle.$$

$$G_{AB}^K(t-t') = -i \left\langle \{A(t), B(t')\}_+ \right\rangle$$

На этом слайде $\hbar = 1$

$$\begin{aligned} G_{AB}^K(t, t') &= -i \left\langle \{A(t), B(t')\}_+ \right\rangle = -i \operatorname{tr} \left(\rho \left\{ e^{-iHt} A e^{-iHt}, e^{iHt'} B e^{-iHt'} \right\}_+ \right) = \\ &= -i \operatorname{tr} \left(\rho \left(e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} B e^{-iHt'} + e^{iHt'} B e^{-iHt'} e^{iHt} A e^{-iHt} \right) \right) = \\ &= -i Z^{-1} \operatorname{tr} \left(e^{-\beta H} \left(e^{-iHt'} e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} B + B e^{-iHt'} e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} \right) \right) = \\ &= -i Z^{-1} \operatorname{tr} \left(e^{-\beta H} \left(e^{iH(t-t')} A e^{-iH(t-t')t} B + B e^{iH(t-t')t} A e^{-iH(t-t')t} \right) \right) = \\ &= -i \left\langle \{A(t-t'), B(0)\}_+ \right\rangle = G_{AB}^K(t-t'). \end{aligned}$$

$$G_{AB}^K(t-t') = -i \left\langle \{A(t), B(t')\}_+ \right\rangle,$$

$$G_{AB}^r(t-t') = -i\theta(t-t') \left\langle [A(t), B(t')]_- \right\rangle = \left\langle \left\langle A(t) \mid B(t') \right\rangle \right\rangle.$$



$$G_{AB}^K(\omega) = -i \int dt \left\langle \{A(t), B(0)\}_+ \right\rangle e^{i\omega t},$$

$$G_{AB}^r(\omega) = \int dt \left\langle \left\langle A(t) \mid B(0) \right\rangle \right\rangle e^{i\omega t}.$$

$$G_{AB}^K(\omega) = 2i \operatorname{Im} \left(G_{AB}^r(\omega) \right) \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right).$$

$$G_{AB}^K(t-t') = -i \left\langle \left\{ A(t), B(t') \right\}_+ \right\rangle,$$

$$G_{AB}^r(t-t') = -i\theta(t-t') \left\langle \left[A(t), B(t') \right]_- \right\rangle = \left\langle \left\langle A(t) \mid B(t') \right\rangle \right\rangle.$$

$$G_{AB}^K(\omega) = -i \int dt \left\langle \left\{ A(t), B(0) \right\}_+ \right\rangle e^{i\omega t},$$

$$G_{AB}^r(\omega) = \int dt \left\langle \left\langle A(t) \mid B(0) \right\rangle \right\rangle e^{i\omega t}.$$

ФДТ --

**Флуктуационно
Диссипативная Теорема**

(д-во на лекции):

$$G_{AB}^K(\omega) = 2i \operatorname{Im} \left(G_{AB}^r(\omega) \right) \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right).$$

Вернемся к задаче про коррелятор
координаты броуновской частицы

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = 2\langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle$$


Исследуем поведение корреляторов:

$$\langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle = iG_{xx}^K(t)$$

$$-i\theta(t)\langle [\hat{x}(t), \hat{x}(0)] \rangle = G_{xx}^R(t)$$

$$-i\theta(t) \langle [x(t), x(0)] \rangle = G_{xx}^R(t) = \langle \langle x(t) | x(0) \rangle \rangle,$$

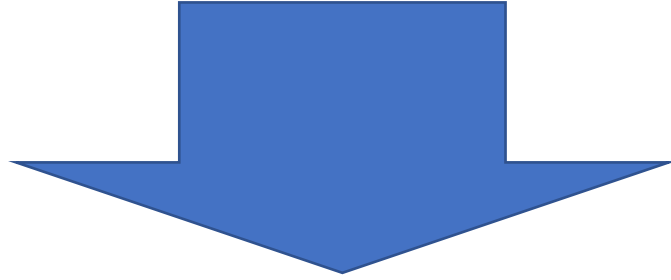
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle x(t) | x(0) \rangle \rangle &= -i\theta(t) \langle [\dot{x}(t), x(0)] \rangle - i\delta(t) \langle [x(t), x(0)] \rangle = \\ &= \langle \langle \dot{x}(t) | x(0) \rangle \rangle - i\delta(t) \langle [x(0), x(0)] \rangle = \langle \langle \dot{x}(t) | x(0) \rangle \rangle. \end{aligned}$$



$$-i\omega G_{xx}^R(\omega) = G_{\dot{x}x}^R(\omega).$$

$$-i\omega \langle \langle x(\omega) | x \rangle \rangle = \langle \langle \dot{x}(\omega) | x \rangle \rangle.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \langle x(t) | x(0) \rangle \rangle = \langle \langle \dot{x}(t) | x(0) \rangle \rangle.$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \langle x(t) | x(0) \rangle \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle \dot{x}(t) | x(0) \rangle \rangle = \langle \langle \ddot{x}(t) | x(0) \rangle \rangle - i\delta(t) \langle [\dot{x}(0), x(0)] \rangle \\ -i\omega \langle \langle \dot{x}(\omega) | x \rangle \rangle &= \langle \langle \ddot{x}(\omega) | x \rangle \rangle - i \langle [\dot{x}, x] \rangle. \end{aligned}$$

В итоге,

$$\left\{ \begin{array}{l} -i\omega \langle \langle x(\omega) | x \rangle \rangle = \langle \langle \dot{x}(\omega) | x \rangle \rangle, \\ -i\omega \langle \langle \dot{x}(\omega) | x \rangle \rangle = \langle \langle \ddot{x}(\omega) | x \rangle \rangle - i \langle [\dot{x}, x] \rangle, \\ \dots \end{array} \right.$$

Поверим в то, что квантовые операторы
тоже удовлетворяют ур. Ланжевена

$$\ddot{x} + \nu \dot{x} = f(t) \Rightarrow \ddot{x} = f(t) - \nu \dot{x}.$$

$$\begin{cases} -i\omega \langle \langle x | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega}, \\ -i\omega \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \ddot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} - i \langle [\dot{x}, x] \rangle. \end{cases}$$

$$[\dot{x}, x] = -i,$$

$$\langle \langle f(t) | x(t') \rangle \rangle = -i\theta(t - t') \langle [f(t), x(t')]_- \rangle = 0.$$

Поверим в то, что квантовые операторы
тоже удовлетворяют ур. Ланжевена

$$\ddot{x} + \nu \dot{x} = f(t) \Rightarrow \ddot{x} = f(t) - \nu \dot{x}.$$

$$\begin{cases} -i\omega \langle \langle x | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega}, \\ -i\omega \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \ddot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} - i \langle [\dot{x}, x] \rangle. \end{cases}$$

$$[\dot{x}, x] = -i,$$

$$\langle \langle f(t) | x(t') \rangle \rangle = -i\theta(t - t') \langle [f(t), x(t')]_- \rangle = 0.$$

Поверим в то, что квантовые операторы
тоже удовлетворяют ур. Ланжевена

$$\ddot{x} + \nu \dot{x} = f(t) \Rightarrow \ddot{x} = f(t) - \nu \dot{x}.$$

$$\begin{cases} -i\omega \langle \langle x | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega}, \\ -i\omega \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \ddot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} - i \langle [\dot{x}, x] \rangle = -\nu \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} - \hbar. \end{cases}$$

$$[\dot{x}, x] = -i\hbar,$$

$$\langle \langle f(t) | x(t') \rangle \rangle = -i\theta(t - t') \langle [f(t), x(t')]_- \rangle = 0.$$

$$\begin{cases} -i\omega \langle \langle x | x \rangle \rangle_{\omega} = \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega}, \\ -i\omega \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} = -\nu \langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} - \hbar. \end{cases}$$



$$\langle \langle \dot{x} | x \rangle \rangle_{\omega} = \frac{\hbar}{i\omega - \nu}.$$



$$\langle \langle x | x \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{-i\omega} \frac{\hbar}{i\omega - \nu}.$$

$$\left\langle\left\langle x \mid x \right\rangle\right\rangle_{\omega} = \frac{1}{-i\omega} \frac{\hbar}{i\omega - \nu}.$$



$$\text{Im} \left\langle\left\langle x \mid x \right\rangle\right\rangle_{\omega} = -\frac{\hbar \nu}{\omega(\omega^2 + \nu^2)}.$$

$$G_{AB}^K(\omega) = 2i \text{Im} \left\langle\left\langle A \mid B \right\rangle\right\rangle_{\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

ФДТ:

$$G_{AB}^K(\omega) = 2i \operatorname{Im} \left\langle \left\langle A \mid B \right\rangle \right\rangle_{\omega} \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2T} \right).$$

$$\operatorname{Im} \left\langle \left\langle x \mid x \right\rangle \right\rangle_{\omega} = - \frac{\hbar \nu}{\omega (\omega^2 + \nu^2)}.$$

$$-i \left\langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \right\rangle_{\omega} = 2i \frac{-\hbar \nu}{\omega (\omega^2 + \nu^2)} \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2T} \right),$$

$$\left\langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \right\rangle_{\omega} = \frac{2\hbar \nu}{\omega (\omega^2 + \nu^2)} \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2T} \right).$$

Подведем Итоги:

$$\langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \rangle_{\omega} = \frac{2\hbar\nu}{\omega(\omega^2 + \nu^2)} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = 2\langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle$$

Тогда получим:

$$\langle x(t)x(0) + x(0)x(t) \rangle_{\omega} = \frac{2\hbar\nu}{\omega(\omega^2 + \nu^2)} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

$$\begin{aligned} \langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle &= 2\langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(0)\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(0) \rangle = \\ &= \int \frac{2\nu\hbar}{\omega(\omega^2 + \nu^2)} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) (1 - e^{-i\omega t}) \frac{d\omega}{2\pi} \end{aligned}$$

По своему физическому смыслу, интеграл вещественный.
Поэтому нас интересует интеграл

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = \int \frac{2\nu\hbar}{\omega(\omega^2 + \nu^2)} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) (1 - \cos(\omega t)) \frac{d\omega}{2\pi}$$

В пределе высоких температур,

$$\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \rightarrow \frac{2T}{\hbar\omega}.$$

$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle = \int \frac{4\nu T}{\omega^2(\omega^2 + \nu^2)} (1 - \cos(\omega t)) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$I(t) = \left\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) (\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \right\rangle = \int \frac{4\nu T}{\omega^2 (\omega^2 + \nu^2)} (1 - \cos(\omega t)) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} I(t) = \int \frac{4\nu T}{\omega (\omega^2 + \nu^2)} \sin(\omega t) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{2\nu T}{\pi} \int \frac{\sin(z)}{z \left(\nu^2 + (z/t)^2 \right)} dz \rightarrow_{t \rightarrow \infty}$$

$$\rightarrow \frac{2T}{\pi \nu} \int \frac{\sin(z)}{z} dz = \frac{2T}{\nu}.$$

$$I(t) = \left\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \right\rangle = \int \frac{4\nu T}{\omega^2 (\omega^2 + \nu^2)} (1 - \cos(\omega t)) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} I(t) = \int \frac{4\nu T}{\omega^2 + \nu^2} \cos(\omega t) \frac{d\omega}{2\pi} = \int \frac{4\nu T}{\omega^2 + \nu^2} e^{i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = 2T e^{-\nu|t|}$$



$$\frac{\partial}{\partial t} I(t) = -\frac{2T}{\nu} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu}.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} I(t) = -\frac{2T}{\nu} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu}.$$

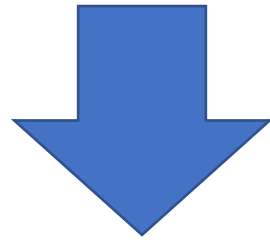


$$I(t) = \frac{2T}{\nu^2} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} = \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}).$$

$$I(t) = \left\langle \left(\hat{x}(t) - \hat{x}(0) \right) \left(\hat{x}(t) - \hat{x}(0) \right) \right\rangle$$

В пределе малых t получаем
баллистическое движение...

$$I(t) = \frac{2T}{\nu^2} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} = \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}).$$

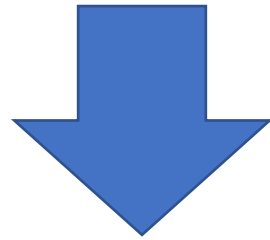


$$\langle (\hat{x}(t) - \hat{x}(0))(\hat{x}(t) - \hat{x}(0)) \rangle \approx \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} \left(1 - 1 + \nu t - \frac{(\nu t)^2}{2} \right) = T t^2 = \langle \mathbf{v}_x^2 \rangle t^2.$$

$$\langle \mathbf{v}_x^2 \rangle = T, \text{ так как } m = 1$$

В пределе больших t получаем диффузию

$$I(t) = \frac{2T}{\nu^2} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} = \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}).$$



$$\langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)) \rangle \approx \frac{6T}{\nu} t = Dt.$$

$$D = 6T / \nu = 6T\tau.$$

Подведем итоги:

$$\langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle = \frac{2T}{\nu^2} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} = \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}),$$

$$\langle (r(t) - r(0))(r(t) - r(0)) \rangle = 3 \left(\frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}) \right).$$

Найдем коррелятор скорости
(классический предел)

$$\langle \dot{x}(t) \dot{x}(0) \rangle.$$

$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle &= 2 \langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(t')\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(t') \rangle, \\ \frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle &= -\frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} (\langle \hat{x}(t')\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(t') \rangle) = \\ &= -\langle \dot{x}(t)\dot{x}(t') + \dot{x}(t')\dot{x}(t) \rangle. \end{aligned}$$

Корреляторы зависят от $t-t'$!!!



$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle &= 2 \langle \hat{x}(0)\hat{x}(0) \rangle - \langle \hat{x}(t')\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(t') \rangle, \\ \frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle &= -\frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} (\langle \hat{x}(t')\hat{x}(t) + \hat{x}(t)\hat{x}(t') \rangle) = \\ &= -\langle \dot{x}(t)\dot{x}(t') + \dot{x}(t')\dot{x}(t) \rangle. \end{aligned}$$

Корреляторы зависят от t-t'!!!



$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle &= -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle (x(t) - x(t'))(x(t) - x(t')) \rangle = \\ &= -\langle \dot{x}(t)\dot{x}(t') + \dot{x}(t')\dot{x}(t) \rangle. \end{aligned}$$

Итак, коррелятор скорости равен

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle = \langle \dot{x}(t)\dot{x}(0) + \dot{x}(0)\dot{x}(t) \rangle.$$

В нашей задаче:

$$\langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle = \frac{2T}{\nu^2} e^{-\nu t} + \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} = \frac{2T}{\nu} t - \frac{2T}{\nu^2} (1 - e^{-\nu t}),$$

$$\frac{1}{2} \langle \dot{x}(t)\dot{x}(0) + \dot{x}(0)\dot{x}(t) \rangle = T e^{-\nu t} = \langle v_x^2 \rangle e^{-\nu t}.$$

Итак, коррелятор скорости равен

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle (x(t) - x(0))(x(t) - x(0)) \rangle = \langle \dot{x}(t)\dot{x}(0) + \dot{x}(0)\dot{x}(t) \rangle.$$

Заметим, что (это проверьте сами):

$$D = \int_0^{\infty} \langle \mathbf{v}(t)\mathbf{v}(0) + \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t) \rangle dt.$$

Задача 13

С.Н. БУРМИСТРОВ

ЗАДАЧИ ПО ФИЗИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

Задача 13

29. Запишем действие S для полной физической системы:
частица + среда

$$S[q(t), x_\alpha(t)] = \int \left[\frac{M\dot{q}^2}{2} - U_0(q) + \sum_\alpha \left(\frac{m\dot{x}_\alpha^2}{2} - \frac{m\omega_\alpha^2 x_\alpha^2}{2} \right) - q \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha \right] dt.$$

Последнее слагаемое отвечает за взаимодействие частицы со средой.
Уравнения движения для частицы и фононов имеют вид

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = - \sum_\alpha C_\alpha x_\alpha,$$

$$m\ddot{x}_\alpha + m\omega_\alpha^2 x_\alpha = -qC_\alpha.$$

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha},$$

$$m\ddot{x}_{\alpha} + m\omega_{\alpha}^2 x_{\alpha} = -qC_{\alpha}.$$

Решение линейного уравнения на $x_{\alpha}(t)$ представим в виде суммы вынужденных и свободных колебаний

$$\begin{aligned} x_{\alpha}(t) &= -C_{\alpha} \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_{\alpha}(t-s)}{m\omega_{\alpha}} q(s) ds + x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K_{\alpha}^R(t-s) q(s) ds + x_{\alpha}^{(\text{св})}(t), \end{aligned}$$

где мы распространили интегрирование по всему возможному интервалу времени, а также ввели *функцию запаздывающего отклика* K_{α}^R

$$K_{\alpha}^R(t) = -\vartheta(t) \frac{C_{\alpha} \sin \omega_{\alpha} t}{m\omega_{\alpha}}$$

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = -\sum C_\alpha x_\alpha,$$

$$\begin{aligned} x_\alpha(t) &= -C_\alpha \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_\alpha(t-s)}{m\omega_\alpha} q(s) ds + x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t-s) q(s) ds + x_\alpha^{(\text{CB})}(t) \end{aligned}$$

Суммарная сила $F(t)$, действующая на частицу, определяется соотношением

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) q(s) ds + f(t),$$

$$f(t) = -\sum_{\alpha} C_\alpha \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right).$$

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = -\sum C_\alpha x_\alpha,$$

$$x_\alpha(t) = -C_\alpha \int_{-\infty}^t \frac{\sin \omega_\alpha(t-s)}{m\omega_\alpha} q(s) ds + x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha^R(t-s) q(s) ds + x_\alpha^{(\text{св})}(t)$$

Суммарная сила $K^R(t) = -\sum_{\alpha} C_\alpha K_\alpha^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_\alpha^2 \frac{\sin \omega_\alpha t}{m\omega_\alpha}$ является соотношением

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) q(s) ds + f(t),$$

$$f(t) = -\sum_{\alpha} C_\alpha \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right).$$

$$K^R(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m \omega_{\alpha}}.$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m [\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega.$$

$$J(\Omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi}{2m} C_{\alpha}^2 \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

Окончательно, мы получим следующее уравнение движения частицы

$$M\ddot{q} + U'_0(q) = \int_{-\infty}^{\infty} K^R(t-s) q(s) ds + f(t).$$

$$K^R(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} K_{\alpha}^R(t) = \vartheta(t) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\sin \omega_{\alpha} t}{m \omega_{\alpha}}.$$

Ее фурье-компонента легко находится и может быть выражена через спектральную плотность $J(\Omega)$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m [\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega.$$
$$f(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$$

$$K^R(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m[\omega_{\alpha}^2 - (\omega + i\delta)^2]} \equiv \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Omega}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} J(\Omega) d\Omega.$$

Разобьем функцию отклика K^R на две части, одна из которых K_0 — частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}},$$

а другая ее часть K_1^R — частотно-зависимая

$$J(\Omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi}{2m} C_{\alpha}^2 \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega,$$

так что $K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega)$. Если $J(\Omega) = \eta\Omega$, то легко убедиться, что

Разобьем функцию отклика K^R на две части, одна из которых K_0 — частотно-независимая

$$K_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} d\Omega = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m\omega_{\alpha}},$$

а другая ее часть K_1^R — частотно-зависимая

$$J(\Omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi}{2m} C_{\alpha}^2 \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega,$$

так что $K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega)$. Если $J(\Omega) = \eta\Omega$, то легко убедиться, что

$$K_1^R(\omega) = i\omega\eta \quad \text{и} \quad K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta.$$

ча $K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - \omega^2 - 2i\omega\delta} d\Omega =$

$$= \frac{2}{\pi} \eta \int_0^\infty \omega^2 i\pi \operatorname{sign}(\omega) \delta(\Omega^2 - \omega^2) d\Omega = i\omega\eta.$$

а другая ее часть K_1^R — частотно-зависимая

$$J(\Omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi}{2m} C_{\alpha}^2 \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

$$K_1^R(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\Omega)}{\Omega} \frac{\omega^2}{\Omega^2 - (\omega + i\delta)^2} d\Omega,$$

так что $K^R(\omega) = K_0 + K_1^R(\omega)$. Если $J(\Omega) = \eta\Omega$, то легко убедиться, что

$$K_1^R(\omega) = i\omega\eta \quad \text{и} \quad K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta.$$

$$K_1^R(\omega) = i\omega\eta \quad \text{и} \quad K^R(\omega) = K_0 + i\omega\eta.$$

Выполняя обратное фурье-преобразование находим временное представление для функции отклика

$$K^R(t) = K_0 \delta(t) - \eta \delta'(t).$$

Подставим $K^R(t)$ в уравнение движения для частицы и вычислим интегралы

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + U'_0(q) &= K_0 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-s) q(s) ds - \eta \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(t-s) q(s) ds + f(t) = \\ &= K_0 q(t) - \eta \dot{q}(t) + f(t). \end{aligned}$$

Предварительный итог:

Это уравнение мы запишем в форме *уравнения Ланжевена* с коэффициентом трения η и силой трения, пропорциональной скорости частицы \dot{q}

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + U'(q) = f(t) \quad \text{и} \quad U(q) = U_0(q) - K_0 q^2 / 2.$$

Таким образом, взаимодействие частицы со средой приводит, во-первых, к перенормировке потенциальной энергии частицы $U_0(q) \rightarrow U(q)$, во-вторых, к возникновению силы трения и, в третьих, к появлению случайной силы $f(t)$, свойства которой зависят от состояния среды.

$$f(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$$

Случайные силы

Перейдем к рассмотрению свойств случайной силы $f(t)$. Поскольку для термодинамически равновесной системы термодинамическое среднее координаты осциллятора и его скорости равны нулю, т.е. $\langle x_\alpha(0) \rangle = 0$ и $\langle \dot{x}_\alpha(0) \rangle = 0$, то среднее значение случайной силы будет также равно нулю

$$\langle f(t) \rangle = 0.$$

Коррелятор силы второго порядка определяется двойной суммой

$$\begin{aligned} \langle f(t) f(t') \rangle = \sum_{\alpha\beta} C_\alpha C_\beta \left\langle \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right) \times \right. \\ \left. \times \left(x_\beta(0) \cos \omega_\beta t' + \frac{\dot{x}_\beta(0)}{\omega_\beta} \sin \omega_\beta t' \right) \right\rangle. \end{aligned}$$

Случайные силы

Перейдем к рассмотрению свойств случайной силы $f(t)$. Поскольку для термодинамически равновесной системы термодинамическое среднее координаты осциллятора и его скорости равны нулю, т.е. $\langle x_\alpha(0) \rangle = 0$

$$f(t) = - \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right)$$

Коррелятор силы второго порядка определяется двойной суммой

$$\begin{aligned} \langle f(t) f(t') \rangle = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha} C_{\beta} \left\langle \left(x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right) \times \right. \\ \left. \times \left(x_{\beta}(0) \cos \omega_{\beta} t' + \frac{\dot{x}_{\beta}(0)}{\omega_{\beta}} \sin \omega_{\beta} t' \right) \right\rangle. \end{aligned}$$

Случайные силы

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha\beta} C_\alpha C_\beta \left\langle \left(x_\alpha(0) \cos \omega_\alpha t + \frac{\dot{x}_\alpha(0)}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha t \right) \times \right. \\ \left. \times \left(x_\beta(0) \cos \omega_\beta t' + \frac{\dot{x}_\beta(0)}{\omega_\beta} \sin \omega_\beta t' \right) \right\rangle.$$

Так как осцилляторы или фононы независимы друг от друга, то среднее для произведения двух величин от разных осцилляторов равно произведению средних, например, $\langle x_\alpha(0)x_\beta(0) \rangle = \langle x_\alpha(0) \rangle \langle x_\beta(0) \rangle = 0$ при $\alpha \neq \beta$, и в сумме останутся только члены с $\alpha = \beta$

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_\alpha^2 \left[\langle x_\alpha(0)^2 \rangle \cos \omega_\alpha t \cos \omega_\alpha t' + \right. \\ \left. + \frac{\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha} \sin \omega_\alpha(t + t') + \frac{\langle \dot{x}_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle}{\omega_\alpha^2} \sin \omega_\alpha t \sin \omega_\alpha t' \right].$$

Для дальнейшего заметим, что термодинамическое среднее произведения координаты и скорости для осциллятора, взятое в один и тот же момент времени равно нулю, т. е. $\langle x_\alpha(0)\dot{x}_\alpha(0) \rangle = 0$, а средний квадрат скорости легко выразить через средний квадрат координаты $\langle \dot{x}_\alpha^2(0) \rangle = \omega_\alpha^2 \langle x_\alpha^2(0) \rangle$ в силу равенства средних для кинетической и потенциальной энергий. Учитывая, что для термодинамически равновесного осциллятора при температуре T

$$\langle x_\alpha^2(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T},$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a),$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a).$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (a^\dagger + a)(a^\dagger + a) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (a^\dagger a + a a^\dagger) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (N_B(\omega) + 1 + N_B(\omega)) = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \operatorname{cth} \left(\frac{\omega}{2T} \right), \quad N_B(\omega) = \frac{1}{\exp \left(\frac{\omega}{T} \right) - 1}.\end{aligned}$$

весного осциллятора при температуре T

$$\langle x_\alpha^2(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_\alpha} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_\alpha}{2T},$$

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \bigg[& \langle x_{\alpha}(0)^2 \rangle \cos \omega_{\alpha} t \cos \omega_{\alpha} t' + \\ & + \frac{\langle x_{\alpha}(0) \dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} (t + t') + \frac{\langle \dot{x}_{\alpha}(0) \dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}^2} \sin \omega_{\alpha} t \sin \omega_{\alpha} t' \bigg]. \end{aligned}$$

$$\langle x_{\alpha}^2(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T},$$

найдем для временного коррелятора силы

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha} (t - t') = \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t - t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t - t') d\Omega. \end{aligned}$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \left[\langle x_{\alpha}(0)^2 \rangle \cos \omega_{\alpha} t \cos \omega_{\alpha} t' + \right. \\ \left. + \frac{\langle x_{\alpha}(0) \dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} (t + t') + \frac{\langle \dot{x}_{\alpha}(0) \dot{x}_{\alpha}(0) \rangle}{\omega_{\alpha}^2} \sin \omega_{\alpha} t \sin \omega_{\alpha} t' \right].$$

$$J(\Omega) = \sum_{\alpha} \frac{\pi}{2m} C_{\alpha}^2 \delta(\Omega - \omega_{\alpha})$$

найдем для вре

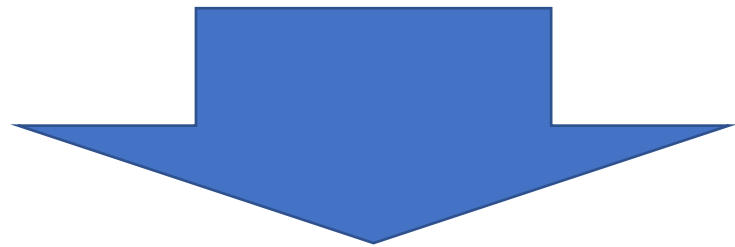
$$\langle f(t)f(t') \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha} (t - t') = \\ = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t - t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega (t - t') d\Omega.$$

$$\begin{aligned}
\langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha}(t - t') = \\
&= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega.
\end{aligned}$$

В силу четности подынтегральной функции нетрудно найти фурье-компоненту временного коррелятора силы или его *спектральную плотность*

$$\begin{aligned}
\langle f(t)f(t') \rangle_{\Omega} &= \int \langle f(t)f(t') \rangle e^{i\Omega(t-t')} \frac{d\Omega}{2\pi} = \eta\hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} = \\
&= \begin{cases} 2\eta T, & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ \eta\hbar|\Omega|, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}
\end{aligned}$$

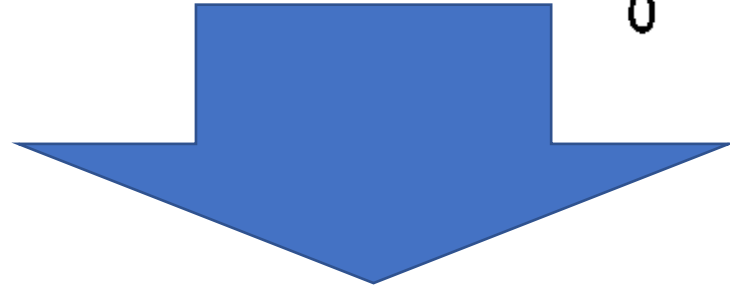
$$\begin{aligned}
 \langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha}(t - t') = \\
 &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega.
 \end{aligned}$$



Во временном представлении коррелятор силы $\langle f(t)f(t') \rangle_{\Omega}$ в двух предельных случаях равен

$$\langle f(t)f(t') \rangle_{\Omega} = \begin{cases} 2\eta T \delta(t - t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta \hbar}{\pi(t - t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\langle f(t)f(t') \rangle &= \sum_{\alpha} C_{\alpha}^2 \frac{\hbar}{2m\omega_{\alpha}} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2T} \cos \omega_{\alpha}(t - t') = \\
&= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} J(\Omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} \cos \Omega(t - t') d\Omega.
\end{aligned}$$



$$\langle f(t)f(t') \rangle = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} \hbar\Omega \frac{2T}{\hbar\Omega} \cos(\Omega(t - t')) d\Omega = \frac{\eta T}{\pi} \int_0^{\infty} (\exp(i\Omega(t - t')) + \exp(-i\Omega(t - t'))) d\Omega =$$

$$= \frac{\eta T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\Omega(t - t')) d\Omega = 2\eta T \delta(t - t').$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle_{\Omega} = \begin{cases} 2\eta T \delta(t - t'), & \text{классический предел, } \hbar = 0, \\ -\frac{\eta \hbar}{\pi(t - t')^2}, & \text{квантовый предел, } T = 0. \end{cases}$$

Выводы из задачи 13

Частица, взаимодействующая с бесконечной системой осцилляторов, получает силу трения и случайные силы...

Что мы сделали... Усреднили по степеням свободы осцилляторов, но не стали усреднять по координатам частицы. Когда так можно делать? Когда осцилляторы – «термостат». Т.е. Мы пренебрегли возмущением системы осцилляторов со стороны частицы. Осцилляторы всегда равновесные!!! Они могут поглотить сколько угодно энергии частицы...