Prof. C. Greiner, Dr. H. van Hees **Wintersemester 2015/2016**

Übungen zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik – Blatt 3

Aufgabe: Diffusion im 3D Gitter

Wir betrachten einen Markovschen Random Walk in einem dreidimensionalen kubischen Gitter mit Gitterabstand a, d.h. ein Teilchen kann sich auf den diskreten Gitterplätzen $\vec{l} = \sum_j l_j a \vec{e}_j$ bewegen. Wir wollen weiter annehmen, daß das Gitter endlich ist und in jeder Richtung N (d.h. insgesamt N^3) Gitterpunkte besitzt, d.h. $l_j \in 0,\ldots,N-1$ und ferner periodische Randbedingungen annehmen.

Der Random-Walk erfolge in diskreten Zeitschritten $t_n = n\tau$, und der Zufallsprozeß sei ein Markov-Prozeß, d.h. die Wahrscheinlichkeiten, daß sich das Teilchen nach $n+1$ Zeitschritten am Gitterpunkt $\vec{l}$ befindet, ergibt sich aus der Kenntnis der Verteilung nach n Zeitschritten gemäß

$$P_{n+1}(\vec{l}) = \sum_{\vec{l}'} w(\vec{l}|\vec{l}')P_n(\vec{l}'). \tag{1}$$

Wir nehmen weiter einfachheitshalber an, daß sich das Teilchen mit jeweils gleicher Wahrscheinlichkeit 1/6 vom Gitterpunkt $\vec{l}'$ zu einem der 6 benachbarten Gitterpunkte bewegen kann.

Um P_n für beliebig vorgegebene Anfangswahrscheinlichkeiten P_0 zu finden, definieren wir die erzeugende Funktion

$$P(\vec{l},z) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\vec{l}) z^n \Leftrightarrow P_n(\vec{l}) = \frac{1}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n} P(\vec{l},z)\right]_{z=0}. \tag{2}$$

(a) Zeigen Sie mit Hilfe von (1), daß die erzeugende Funktion das lineare Gleichungssystem

$$P(\vec{l},z) - z\sum_{\vec{l}'} w(\vec{l}|\vec{l}')P(\vec{l}',z) = P_0(\vec{l}) \tag{3}$$

erfüllt.

(b) Wir definieren nun die dazugehörige „Greensche Funktion“ $G(\vec{l},\vec{l}_0,z)$ durch die Gleichung

$$G(\vec{l},\vec{l}_0,z) - z\sum_{\vec{l}'} w(\vec{l}|\vec{l}')G(\vec{l}',\vec{l}_0,z) = \delta^{(3)}_{\vec{l},\vec{l}_0}. \tag{4}$$

Erklären Sie, warum dann die Lösung der Gleichung (3) durch

$$P(\vec{l},z) = \sum_{\vec{l}_0} G(\vec{l},\vec{l}_0,z)P_0(\vec{l}_0) \tag{5}$$

gegeben ist.

(c) Betrachten Sie nun $G(\vec{l},\vec{l}_0,z) = \hat{G}(z)$ und $w(\vec{l}|\vec{l}')$ als $N^3 \times N^3$-Matrizen und zeigen Sie, daß formal die Green-Funktion durch

$$\hat{G} = (\mathbb{1} - z\hat{w})^{-1} \tag{6}$$

gegeben ist.

(d) Zeigen Sie weiter, daß

$$\psi_{\vec{q}}(\vec{l}) = \frac{1}{\sqrt{N^3}} \exp(\mathrm{i}\vec{q}\vec{l}). \tag{7}$$

mit den gemäß den periodischen Randbedingungen gewählten $\vec{q}$ genau N^3 Eigenvektoren von $\hat{w}$ bilden, d.h. es gilt

$$\sum_{\vec{l}'} w(\vec{l}|\vec{l}')\psi_{\vec{q}}(\vec{l}') = \lambda(\vec{q})\psi_{\vec{q}}(\vec{l}) \tag{8}$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda(\vec{q}) = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{3} \cos(a q_k). \tag{9}$$

Zeigen Sie weiter, daß die $\psi_{\vec{q}}(\vec{l})$ eine orthonormiertes Basis von Vektoren im N^3-dimensionalen unitären Vektorraum bilden, wobei das Skalarprodukt wie üblich durch

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{\vec{l}} \psi_1^*(\vec{l})\psi_2(\vec{l}) \tag{10}$$

definiert ist[1].

(e) Zeigen Sie nun, daß daraus wegen (6)

$$G(\vec{l}, \vec{l}_0, z) = \sum_{\vec{q}} \frac{\psi_{\vec{q}}(\vec{l})\psi^*_{\vec{q}}(\vec{l}_0)}{1 - z\lambda(\vec{q})} \tag{11}$$

folgt.

(f) Für große N kann man nun von Summen über $\vec{q}$ zu Integralen übergehen:

$$(1/N^3)\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{a^3}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi/a} \mathrm{d}q_1 \int_0^{2\pi/a} \mathrm{d}q_2 \int_0^{2\pi/a} \mathrm{d}q_3 = a^3 \int_{[0,2\pi/a]^3} \frac{\mathrm{d}^3\vec{q}}{(2\pi)^3}. \tag{12}$$

Zeigen Sie nun, daß für $P_0(\vec{l}) = \delta^{(3)}_{\vec{l},0}$

$$P_n(\vec{l}) = \frac{1}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n} G(\vec{l}, 0, z)\right]_{z=0} = a^3 \int_{[0,2\pi/a]^3} \frac{\mathrm{d}^3\vec{q}}{(2\pi)^3} \lambda^n(\vec{q}) \exp(\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{l}) \tag{13}$$

gilt. Für große n tragen nur kleine $\vec{q}$ bei. Zeigen Sie daß man mit der Näherung $\lambda^n(\vec{q}) \simeq (1 - a^2\vec{q}^2/6)^n \simeq \exp(-na^2\vec{q}^2/6)$ für P_n auf eine Gauß-Verteilung mit $\left\langle \vec{l} \right\rangle = 0$ und $\left\langle l_i l_j \right\rangle = \delta_{ij} n a^2/3$ kommt (wie aus dem zentralen Grenzwertsatz zu erwarten).

(g) Zeigen Sie, daß die Rückkehrhäufigkeit

$$P(0) = \sum_{n=1}^{\infty} P_n(0) = G(\vec{l}, 0, z = 1) - 1 \tag{14}$$

in 3 Dimensionen endlich ist. Wie sieht es damit in 1 oder 2 Dimensionen aus?

Homepage zu Vorlesung und Übungen:
`http://fias.uni-frankfurt.de/~hees/neq-therm-WS15/`

[1] Die Ähnlichkeit zur Quantentheorie ist nicht zufällig sondern unvermeidlich ;-))