

Prof. Dr. Tobias Brandes  
Dr. Javier Cerrillo

## 7. Übungsblatt – Statistische Mechanik

**Abgabe: Mi. 14.01.2015 im Tutorium**

*Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.*

**Aufgabe 13 (10 Punkte):** *Stochastische Methoden und thermisches Gleichgewicht*

Das Gleichgewicht eines Systems, das stark mit einem thermischen Bad wechselwirkt, weicht im Allgemeinen vom Gibbschen Zustand ab. Der Hamiltonian des Systems  $H_S$  und des Bades  $H_B$  und die Wechselwirkung zwischen den beiden bilden den gesamten Hamiltonian

$$(1) \quad H = H_S + f(\hat{q})\hat{x}_B + H_B,$$

wobei  $f(\hat{q})$  eine allgemeine Funktion der Koordinate des Systems  $\hat{q}$  ist und  $\hat{x}_B$  ein Operator des Bades ist. Für harmonische Bäder bildet man den Gleichgewichtszustand als Durchschnitt von (nicht-normalisierten) imaginären Zeitentwicklungen von der stochastischen Schrödinger-Gleichung

$$(2) \quad \frac{d}{d\beta}\rho_\xi = - (H_S + \xi(\beta)f(\hat{q}))\rho_\xi.$$

1. Zeigen Sie, dass der Gleichgewichtszustand im Limes schwacher Wechselwirkung den Gibbschen Zustand ergibt.
2. Für den allgemeinen Fall, drücken Sie den Gleichgewichtszustand als Pfadintegral aus und ermitteln Sie das Influenz-Funktional.
3. Benutzen Sie die Hubbard-Stratonovich-Transformation auf dem Influenz-Funktional um deren Wirkung gemäß  $f(\hat{q})$  zu linearisieren.
4. Ermitteln Sie das stochastische Feld und berechnen Sie die Korrelationsfunktion dessen.

Referenz: J. Moix, Y. Zhao, J. Cao, *Phys. Rev. B* **85**, 115412 (2012).