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

Übungen zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik – Blatt 1

Aufgabe 1: Brownsches Teilchen im harmonischen Oszillator

Ein harmonisch gebundenes Teilchen befinde sich in einer Flüssigkeit im thermischen Gleichgewicht. Die Wechselwirkung des Teilchens mit der Flüssigkeit werde durch eine Reibungs- und eine fluktuierende Kraft im Sinne eines Langevin-Prozesses beschrieben. Die Bewegungsgleichung lautet also

$$M\ddot{x} = -M\omega^2 x - M\beta\dot{x} + \xi, \tag{1}$$

wobei $\xi(t)$ eine Gauß-verteilte Zufallskraft mit

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = I\delta(t_1 - t_2) \tag{2}$$

ist.

(a) Zeige, daß die Bewegungsgleichung (1) formal durch

$$x(t) = \int_0^t \mathrm{d}t_1 G(t-t_1)\xi(t_1) + x_h(t) \tag{3}$$

gelöst wird. Dabei ist

$$G(t) = \frac{\Theta(t)}{M\tilde{\omega}} \exp\left(-\frac{\beta t}{2}\right) \sin(\tilde{\omega} t), \quad \tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 - \frac{\beta^2}{4}} \tag{4}$$

die Greensche Funktion des gedämpften harmonischen Oszillators ohne fluktuierende Kraft, d.h.

$$M\ddot{G}(t) + M\beta\dot{G}(t) + M\omega^2 G(t) = \delta(t) \tag{5}$$

und

$$x_h(t) = \exp\left(-\frac{\beta}{2}t\right)\left[x_0 \cos(\tilde{\omega} t) + \frac{2\tilde{\omega} v_0 + x_0\beta}{2\tilde{\omega}} \sin(\tilde{\omega} t)\right] \tag{6}$$

die Lösung der homogenen Differentitialgleichung für den gedämpften harmonischen Oszillator mit beliebigen Anfangsbedingungen $x(0) = x_0$, $v(0) = \dot{x}(0) = v_0$.

(b) Berechne die Erwartungswerte $\langle x(t) \rangle$, $\langle v(t) \rangle$, $\left\langle x^2(t) \right\rangle$ und $\left\langle v^2(t) \right\rangle$.

(c) Für $t \to \infty$ muß das Teilchen ins thermische Gleichgewicht zum Wärmebad mit der Temperatur dieses Wärmebads gelangen. Zeige anhand der eben berechneten Mittelwerte, daß das Teilchen tatsächlich unabhängig vom Anfangszustand in dasselbe Gleichgewicht gelangt.

(d) Verwende das Äquipartitionstheorem, wonach im Gleichgewicht (also für $t \to \infty$)

$$\langle H \rangle = \langle E \rangle = \left\langle \frac{m}{2} v^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right\rangle = k_\mathrm{B} T \tag{7}$$

gelten muß. Was impliziert dies für die das Wärmebad charakterisierenden Parameter β und I?

(e) (**Knobelaufgabe**) Wie lautet die Nichtgleichgewichtsphasenraumverteilung $f(t,x,v)$, wenn das Teilchen stets mit der Anfangsbedingung $x(0) = x_0$ und $\dot{x}(0) = v_0$ initialisiert wird? Argumentieren Sie dazu, daß diese Verteilung stets eine Gauß-Verteilung sein muß, da die Integration der Bewegungsgleichung als „Addition" vieler gaußverteilter Zufallszahlen interpretiert werden kann.

Berechne dann die Kovarianzmatrix

$$\hat{\sigma}_{\text{eq}} = \lim_{t\to\infty} \begin{pmatrix} \left\langle (x-\langle x\rangle)^2 \right\rangle & \langle (x-\langle x\rangle)(v-\langle v\rangle)\rangle \\ \langle (x-\langle x\rangle)(v-\langle v\rangle)\rangle & \left\langle (v-\langle v\rangle)^2 \right\rangle \end{pmatrix} \tag{8}$$

und verifiziere, daß im Limes $t \to \infty$ die korrekte Boltzmannverteilung für das thermische Gleichgewicht resultiert!

Hinweis: Die Phasenraumverteilung für endliche Zeiten braucht nicht berechnet zu werden!

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