UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de
PD Dr. Rudolf Haussmann
E-mail: rudolf.haussmann@gmx.de

Übungen zur Vorlesung: Stochastische Prozesse
mit Anwendung in Statistischer Physik und auf Finanzmärkte,
Wintersemester 2011/12

Übungsblatt 9, Ausgabe 20.12.2011, Abgabe und Besprechung am 10.1.2012

1. **Spinkorrelation im Glauber Modell** (*5 Punkte)*
Zeitliche Korrelationsfunktionen sind von großer Bedeutung da sie dynamische Antwortfunktionen auf Externe Störungen eines Systems beschreiben. Mit Hilfe des Glauber Modells ist es möglich die zeitlichen Korrelationsfunktionen des Ising Modells mit Hamiltonian

$$H = -J \sum_{n=1}^{N} \sigma_n \sigma_{n+1}$$

und der Kopplungskonstante J im kanonischen Ensemble zu bestimmen. Dabei wird angenommen, dass es eine Übergangsahrscheinlichkeit $w_j(\sigma_j)$ pro Zeiteinheit gibt, dass durch das Wärmebad genau ein Spin ($\sigma \to -\sigma$) umklappt wobei alle anderen Spins in der Ausganspositión verbleiben.
Damit lässt sich eine Mastergleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung aufstellen

$$\frac{d}{dt} P(\{\sigma\}, t) = \sum_{j=1}^{N} w_j(-\sigma) P(\{\sigma'\}_j, t) - \sum_{j=1}^{N} w_j(\sigma) P(\{\sigma\}, t),$$

wobei $\{\sigma\} = \{\sigma_1, ..., \sigma_N\}$ und $\{\sigma'\}_j = \{\sigma_1, ..., -\sigma_j, ..., \sigma_N\}$ für Konfigurationen des Spinsystems stehen.

   (a) Begründen Sie Mastergleichung.
   Nehmen Sie nun an dass die Übergangswahrscheinlichkeiten gegeben sind durch

$$w_j(\sigma_j) = \frac{1}{2}\alpha \left[1 - \frac{1}{2}\gamma \sigma_j (\sigma_{j+1} + \sigma_{j-1}) \right]$$

   wobei $\gamma = \tanh 2K$ mit $K = J/K_B T$, und α^{-1}, einer Zeitskala die als Fitparameter in das Modell eingeht. Zeigen Sie dass die Mikroreversibilität
   $w_j(\sigma_j) P_{eq}(\{\sigma\}) = w_j(-\sigma_j) P_{eq}(\{\sigma'\}_j)$ gilt.

(b) Gegeben sei nun die Zeitkorrelationsfunktion

$$C_n(t) = \langle \sigma_0(0)\sigma_n(t)\rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_0 P(\{\sigma\}, t)\sigma_n. \tag{1}$$

Benutzen Sie die Mastergleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung um

$$\alpha^{-1}\frac{d}{dt}C_n(t) = -C_n(t) + \frac{\gamma}{2}(C_{n+1}(t) + C_{n-1}(t))$$

zu zeigen.
Hinweis: Betrachten Sie komplementäre Spinkonfigurationen in der Summe um diese zu vereinfachen und betrachten Sie die Fälle $n = j$ und $n \neq j$.
Aus der Statistischen Mechanik ist bekannt, dass für die örtliche Korrelation zum Zeitpunkt null $C_n(0) = u^{|n|}$ mit $u = \tanh K$ gilt.
Führen Sie dann eine Fouriertransformation $C(q,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n(t)e^{iqn}$ aus und zeigen Sie dass

$$C(q,t) = \chi(q)\exp[-\alpha(1-\gamma\cos q)t]$$

gilt. Wobei $\chi(q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n(0)e^{iqn}$, die fouriertransformierte statische 2-spin Korrelationsfunktion ist.

(c) Zeigen Sie weiter, dass sich die statische Korrelationsfunktion durch

$$\chi(q) = \frac{\sqrt{1-\gamma^2}}{1-\gamma\cos q}$$

ausdrücken lässt.
Hinweis: Es gilt der Zusammenhang $\gamma = 2u/(u^2+1)$, und es gilt $|u| < 1$.

(d*) Zeigen Sie weiter mit der Rücktransformation $c_n(t) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^{\pi} \mathrm{d}q\, C(q,t)\cos(nq)$, dass man

$$C_n(t) = \sqrt{1-\gamma^2}\int_{\alpha t}^{\infty} \mathrm{d}w\, e^{-w}\, I_n(\gamma w)$$

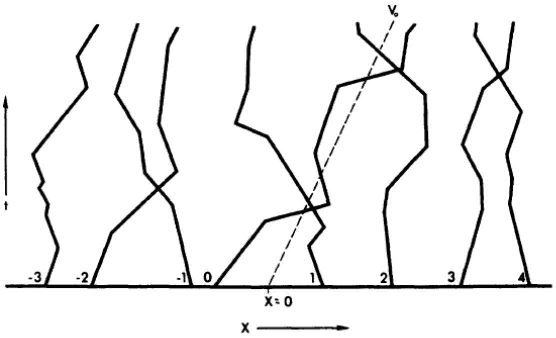
mit $I_n(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \mathrm{d}q\, \exp[x\cos q]\cos(nq)$ (modifizierte Besselfunktion) gilt.
Hinweis: Es gilt $\frac{\exp[-\alpha(1-\gamma\cos q)t]}{1-\gamma\cos q} = \int\limits_{\alpha t}^{\infty} \mathrm{d}w\, \exp[-w(1-\gamma\cos q)]$.

(d) Die Gleichung für $C_n(t)$ aus d) ist numerisch lösbar. Eine Darstellung in standard transzendenten Funktionen ist jedoch nicht möglich. Für lange Zeiten $\alpha\gamma t \gg 1$ und für kleine q lässt sich jedoch ein Ausdruck ableiten. Zeigen Sie, dass

$$C_n(t) \sim \left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^{1/2} \frac{\exp[-\alpha(1-\gamma)t - n^2/(2\alpha\gamma t)]}{(2\pi\alpha\gamma t)^{1/2}}$$

gilt.
Hinweis: Setzen Sie $\chi(q) := \chi(0)$ und entwickeln Sie $\cos q = 1 - \frac{1}{2}q^2$ und lassen Sie die obere Integrationsgrenze gegen Unendlich gehen.

2. **Single-File diffusion** *(5 Punkte)*
Wir betrachten ein eindimensionales System, das aus unendlich vielen durchnummerierten harten Stäbchen besteht, die nebeneinander liegen. Die Stäbchen erfahren zufällige Kraftstöße von einem Wärmebad. Wenn die Stäbchen untereinander stoßen, tauschen Sie aufgrund der Impulserhaltung einfach die Geschwindigkeiten. Damit setzten beide Teilchen die Bahn ihres Stoßpartners fort.



Es wird nun eine 'Testtrajektorie', die die Geschwindigkeit $v_0 t$ hat betrachtet. Weiter wird die Wahrscheinlichkeit $P_R(v_0, n, t)$ definiert, dass n Trajektorien, die rechts der Testtrajektorie gestartet sind nun links von dieser sind. Analog definiert man $P_L(v_0, n, t)$ für die von links kommenden Trajektorien. Immer wenn eines der Teilchen die Testtrajektorie von rechts trifft wird die Nummer des Teilchens links und rechts der Trajektorie um eins erhöht, trifft ein Teilchen von links werden die Nummern um eins erniedrigt.

(a) Sei nun $A_\alpha(v_0, t)$ die Wahrscheinlichkeit, dass das zur Testtrajektorie benachbarte Teilchen auf der rechten Seite um α verändert wurde. Dann ergibt sich

$$A_\alpha(v_0, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_R(v_0, n + \alpha, t) P_L(v_0, n, t).$$

Sei weiter $B_R(x_0)$ die Wahrscheinlichkeit, dass eine Trajektorie die aus dem Bereich zwischen x_0 und $x_0 + d_{x_0}$ von rechts der Testtrajekorie kommt und nach der Zeit $t < (v_0 t)/x$ auf der linken Seite ist. Es soll angenommen werden, dass eine einzelne Trajektore gemäß $(4\pi Dt)^{-1/2} \exp[-(x - x_0)^2/4Dt]$ verteilt ist. Argumentieren Sie dass dann

$$B_R(x_0) dx_0 = \rho dx_0 (4\pi t D)^{-1/2} \int_{-\infty}^{v_0 t} \exp[-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}] dx$$

gilt, wobei ρ die Dichte der Teilchen ist. Substituieren Sie das Integral um die 'handlichere' Form

$$B_R(x_0) dx_0 = \rho dx_0 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\beta} \exp[-\alpha^2] d\alpha$$

mit $\beta = (v_0 t - x_0)/2(Dt)^{1/2}$ zu erhalten.

(b) Da jede Trajektorie unabhängig von den anderen ist gilt die obige Gleichung für jedes dx_0. Die Wahrscheinlichkeit, dass n Trajektorien bei $x_0 > 0$ starten und bei $x < v_0 t$ enden ist dann gegeben durch eine Poissonverteilung mit Erwartungswert

$$\overline{B}_R = \int_0^{\infty} B_R(x_0)\, dx_0.$$

Formen Sie um zu

$$\overline{B}_R = 2\rho \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \int_{-\infty}^{\gamma} (\gamma - \beta) \exp[-\beta^2]\, d\beta.$$

Analog erhält man

$$\overline{B}_L = 2\rho\sqrt{\frac{Dt}{\pi}}\int_{\gamma}^{\infty}(\beta-\gamma)\exp[-\beta^2]\,d\beta.$$

Folgern Sie dass dann

$$A_\alpha(v_0,t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\overline{B}_R}\frac{\overline{B}_R^{n+\alpha}}{(n+\alpha)!}e^{-\overline{B}_L}\frac{\overline{B}_L^n}{n!}.$$

gilt.

(c) Betrachten Sie nun $A_0(v_0,t)$: Dies ist die Wahrscheinlichkeit, dass die selben Teilchen die anfangs bei $x=0$ links und rechts waren, jetzt links und rechts von $v_0 t$ sind. Für lange Zeiten ist das die Verteilung für $\rho(x,t)$.
Argumentieren Sie dass für große Zeiten

$$A_0(t) \to \frac{1}{\sqrt{4\pi\sqrt{\overline{B}_L\overline{B}_R}}}e^{-\left(\sqrt{\overline{B}_L}-\sqrt{\overline{B}_R}\right)^2}$$

gilt.
Nähern Sie $\gamma \ll 1$ um

$$\overline{B}_R \approx \rho\sqrt{\frac{Dt}{\pi}}[1+\sqrt{\pi}\gamma] \text{ und } \overline{B}_L \approx \rho\sqrt{\frac{Dt}{\pi}}[1-\sqrt{\pi}\gamma]$$

zu zeigen.

(d) Benutzen Sie das Ergebnis in A_0 ein um schließlich die Verteilung $\rho(x,t)$ zu erhalten.
Hinweis: Es folgt $\rho(x,t) = \frac{\sqrt{\rho}}{2(Dt)^{1/4}}\exp[-\rho x^2[\pi/(16Dt)]^{1/2}]$
Was folgt für die t-Abhängigkeit des mittleren Verschiebungsquadrates $\langle (x(t)-x(0))^2\rangle$?