

Seminar "Spezielle Probleme der statistischen Physik"

Ort: Seminarraum 26 C 401
Zeit: Dienstags um 16.00 Uhr

Im Rahmen dieses Seminars wird das Programm wie folgt fortgesetzt:

- 23.05.1989 K. Henneberger (PH Güstrow, DDR, z.Zt. Univ. Dortmund)
Laseranregung von Halbleitern: Sättigungskinetik, Photonstatistik
und Pulsausbreitung
- 30.05.1989 K. Schneider (FU Berlin)
Über die Streuung in eindimensionalen ungeordneten Systemen
- 06.06.1989 J.V. Sengers (University of Maryland)
Fluctuations in Nonequilibrium Fluids
- 13.06.1989 V. Zlatic (Univ. Zagreb, z.Zt. Univ. Köln)
Perturbative approach to systems with local correlations

Das weitere Programm wird später bekanntgegeben.

Gäste sind herzlich willkommen.

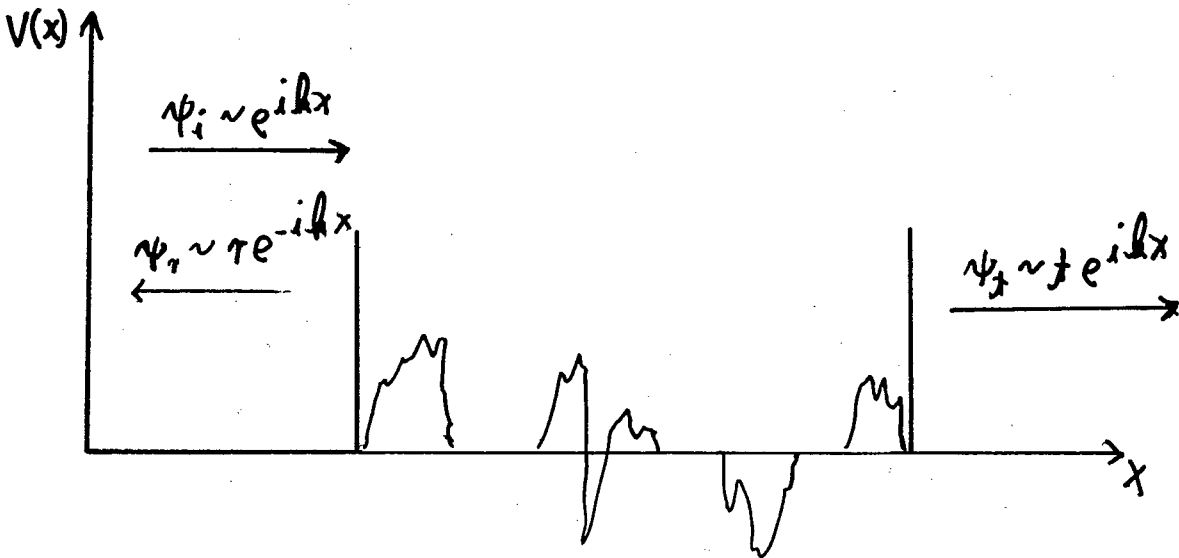
0

Streuung in 1D ungeordneten Systemen

1. Einführung
2. Der Widerstand bei hohen Dichten
3. Spektralanalyse knackt die Nuß
4. Lineare Widerstand?

1. Einführung

In 1D haben wir folgende Situation



Kette von Hindernissen (z. B. Potentialen)

Bild 1

Motiv:

- Ausbreitung von Phononen, Licht
 - Wärmeleitung
 - elektr. Widerstand
 - 1D Modell u. U. exakt lösbar
 - keine Störungsrechnung vom period. Fall ausgehend
- z. B. Yafii (73)
Erdős & Harendon (82)
Emr (87)

Empirisch gesichert:

■ Transmissionsmaxima entsprechen erlaubten Zuständen. ■

Landauer (1970):

$$R \sim g := \frac{|r|^2}{|t|^2}$$

R : elektr. Widerstand (z. Z. ca. 50 Atome (Jahr))

Probleme:

- $\langle g \rangle_N \sim e^{\alpha N}$ Landauer (1970)

- $\frac{\langle g^2 \rangle_N - \langle g \rangle_N^2}{\langle g \rangle_N^2} \sim e^{\beta N} \in \mathcal{RH}(82)$

- $\ln(1+g)$ gaußförmig verteilt (Anderson et al. (80))
Berechnung von $\langle \ln(1+g) \rangle$?

- Berechnung von $p(g)$, $p(\ln(1+g))$, $\langle \sigma \rangle_N = \langle \frac{1}{g} \rangle_N, \dots$?

2. Der Widerstand bei hohem Dichten

a) Modell:

δ -Potentiale verteilt mit Poisson-Statistik über ein Liniensegment fester Länge [siehe Eberk, 1987, Dissertation und Felderhof & Ford, 1986]

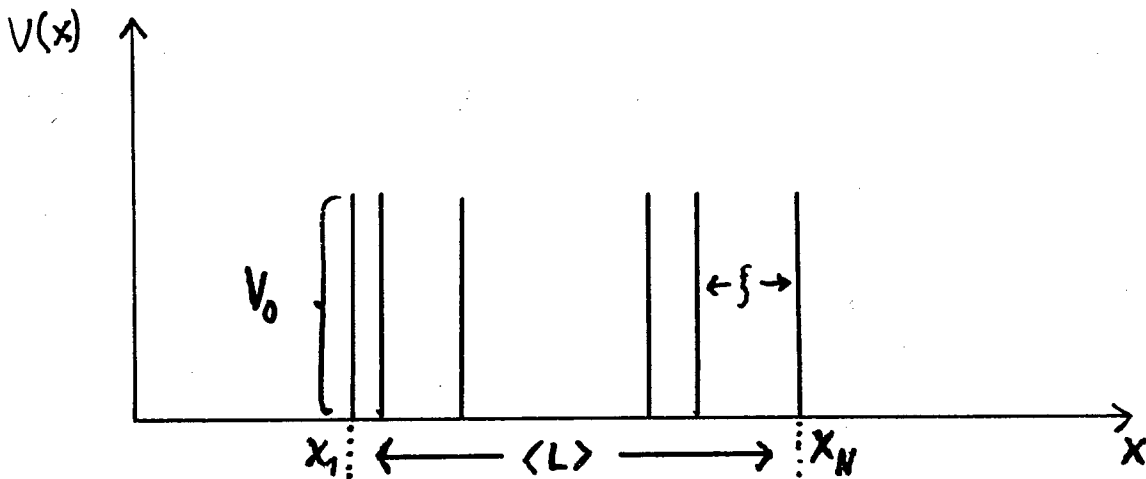


Bild 2

$$p(\xi) = n e^{-n\xi}$$

$$V(x) = V_0 \sum_{j=1}^N \delta(x-x_j)$$

$$p(L) = n e^{-nL} \frac{(nL)^{N-2}}{(N-2)!}$$

Eigenschaften der Längenverteilung

$$\langle L \rangle = \frac{N-1}{n}$$

$$\sigma_L^2 = \langle L^2 \rangle - \langle L \rangle^2 = \frac{\langle L \rangle}{n}$$

Die Modelle mit freien und festen Enden, kommen sich im $\lim_{n \rightarrow \infty}$ beliebig nahe.

$$\langle L \rangle = \text{const.}$$

b) Wie berechnen wir $\langle \rho \rangle, \langle \rho^2 \rangle \dots$?

Allgemein:

Die Streuamplituden rechts und links des Systems sind durch eine Transformation verknüpft.

$$T_N = A_N G_{N-1} A_{N-1} G_{N-2} \dots G_2 A_2 G_1 A_1$$

mit

$$G_j = \begin{pmatrix} e^{ik\xi_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\xi_j} \end{pmatrix}, \quad \xi_j = x_{j+1} - x_j$$

$$\langle \rho \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle G_3 \rangle \langle A_3 \rangle \Big|_{00}^N - \frac{1}{2} \right)$$

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{1}{6} \left(\langle G_5 \rangle \langle A_5 \rangle \Big|_{00}^N - \langle \rho \rangle - \frac{1}{6} \right)$$

3D Darstellung } Irreduzibel!
5D " }

Die nach den Verfahren von EKH(82), Abrahams & Stephens (80), Pendry (81) und Felderhof (86) gewonnenen 3D bzw. 5D Darstellungen sind alle äquivalent.

b) Wie berechnen wir $\langle p \rangle, \langle p^2 \rangle, \dots$?

Allgemeiner Fall:

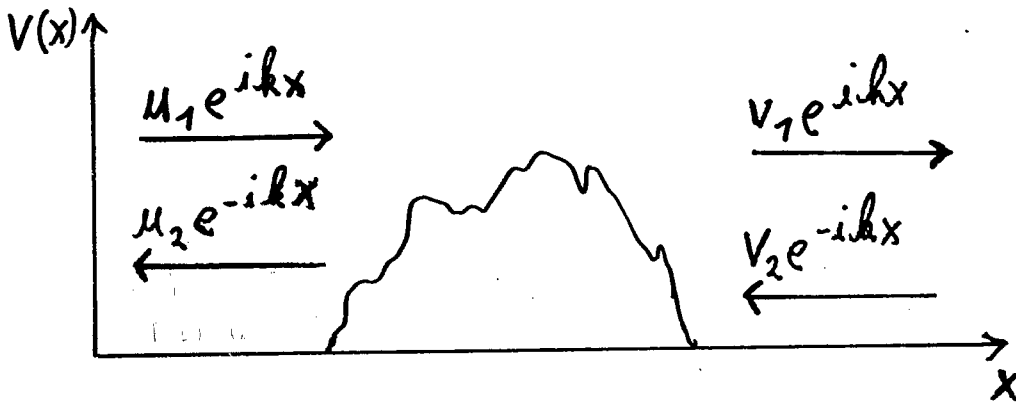


Bild 3

allgemeine Lösung:

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}; \quad T = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & a^* \end{pmatrix} \in SU(1,1)$$

Streulösung:

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}; \quad T = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}$$

N -Streuer:

$$T_G = T_N T_{N-1} \dots T_2 T_1$$

Extraktion des Abstandes zwischen den Potentialen.

$$T_G = A_N G_{N-1} A_{N-1} G_{N-2} \dots G_2 A_2 G_1 A_1$$

mit

$$G_j = \begin{pmatrix} e^{ik\xi_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\xi_j} \end{pmatrix}; \quad \xi_j = x_{j+1} - x_j$$

Mitteln führt auf

$$\langle T_G \rangle = \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{t^*} \rangle & \langle -\frac{r^*}{t^*} \rangle \\ \langle -\frac{r}{t} \rangle & \langle \frac{1}{t} \rangle \end{pmatrix} = \langle G \rangle^{-1} (\langle G \rangle \langle A \rangle)^N$$

Wir benötigen aber $\langle \frac{|r|^{2,h}}{|t|^{2,h}} \rangle$; $h \in \mathbb{N}$!

Irreducible 3D Darstellung

Allgemeine Lösung:

$$\begin{pmatrix} V_1^2 \\ V_1 V_2 \\ V_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 & 2af^* & f^{*2} \\ af & (|a|^2 + |f|^2) & a^* f^* \\ f^2 & 2a^* f & a^{*2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1^2 \\ \mu_1 \mu_2 \\ \mu_2^2 \end{pmatrix}$$

Strenzlösung:

$$\begin{pmatrix} f^2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1+2g & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ g \\ g^2 \end{pmatrix}$$

also

$$\langle g \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle G_3 \rangle \langle A_3 \rangle \Big|_{00}^N - \frac{1}{2} \right)$$

Irreducible 5D Darstellung

Streulösung:

$$\begin{pmatrix} t^4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1+6\rho+6\rho^2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \end{pmatrix}$$

also

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{1}{6} \left(\langle G_5 \rangle \langle A_5 \rangle \right)_{00}^N - \langle \rho \rangle - \frac{1}{6}$$

Die nach dem Verfahren von ErH (82), Abraham & Stephen (80), Pendry (81) und Felderhof (86) gewonnenen 3D bzw. 5D Darstellungen sind alle äquivalent.

PS-Modell:

$$\langle G_2 \rangle = \begin{pmatrix} \frac{v}{v-i} & 0 \\ 0 & \frac{v}{v+i} \end{pmatrix} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i}{v} & 0 \\ 0 & 1 - \frac{i}{v} \end{pmatrix} + O_2\left(\frac{1}{v^2}\right)$$

$$v = \frac{\hbar \omega}{\hbar}$$

$$\langle G_3 \rangle = \begin{pmatrix} \frac{v}{v-2i} & & \\ & 1 & \\ & & \frac{v}{v+2i} \end{pmatrix} \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1 + \frac{2i}{v} & & \\ & 1 & \\ & & 1 - \frac{2i}{v} \end{pmatrix} + O_3\left(\frac{1}{v^2}\right)$$

Was ist das?

$$\langle G_3 \rangle \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \langle G_2 \rangle_3 + O_3\left(\frac{1}{v^2}\right)$$

Ja, lüg' ich denn!

$$\langle G_5 \rangle \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \langle G_2 \rangle_5 + O_5\left(\frac{1}{v^2}\right)$$

Was hat dies zu bedeuten?

Das Problem ist in erster Ordnung gelöst, da es auf die 2D Darstellung zurückgeführt werden kann.

Ohne Rechnung schließen wir

$$\langle g^n \rangle_{v \rightarrow \infty} = |\langle \frac{\pi}{f} \rangle|^{2n} + \text{hot}$$

$$\sigma^2 = \frac{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2}{v \rightarrow \infty} = 0 + \text{hot}$$

hot: higher order terms

Wir spannen alle Kräfte an, diagonalisieren eine 2×2 Matrix und bekommen

$$\langle g \rangle = \frac{\beta N}{2\hbar \langle L \rangle} \sinh^2(\sqrt{2\beta \hbar \langle L \rangle N}) + \text{const}$$

$(N \rightarrow \infty)$

$$V = \frac{N}{\hbar \langle L \rangle} ; \beta = \frac{m V_0}{\hbar^2 k}$$

Dies ist genau der Wert für das "optische Potential" (Rechteckpotential), wie bereits von Felderhof und Ford (86) vermutet, die den Exponenten für $\beta > 0$ fanden.

Das Anwachsen von $\langle g \rangle$ mit $e^{a\sqrt{N}}$ (für $\beta > 0$) stimmt mit numerischen Studien von Eberle & Erdős überein.

Eberle hatte in seiner (unveröffentlichten) Dissertation auch das Verhalten von $\langle g \rangle$ für $\beta < 0$ gefunden, sein Ergebnis aber verworfen.

3. Spektralanalyse knackt die Nuß

Wir beobachten

$\{T\} \cong SU(1,1)$ (Gruppenzugehörigkeit)

$$T = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\varrho} & \sqrt{\varrho} \\ \sqrt{\varrho} & \sqrt{1+\varrho} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\psi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{Parametrisierung})$$

$$0 \leq \varphi < 2\pi; 0 < \varrho < \infty; -2\pi \leq \psi < 2\pi.$$

Idee:

Funktionen auf der Gruppe spektral, d. h. nach den irreduziblen unitären Darstellungen zerlegen.

[Mello (86) und Kirkman & Pendry (84)]

Für Funktionen des Widerstandes alleine ist dies besonders einfach

$$R(\varrho_{\text{ges}}) = \int_0^{\infty} a_{00}^{\varrho} P_{00}^{1/2+i\varrho} (T_{\text{ges}}) W(\varrho) d\varrho$$

mit dem Spektraloeffizienten

$$a_{00}^q = \int_0^{\infty} f(q) P_{00}^{1/2+iq}(q) dq$$

Analyse einer einrigen Fkt.

$$G_N(\mu, \nu, s) := \langle q^\mu (1+q)^\nu e^{-qs} \rangle_N = \int_0^{\infty} a_{00}^q \langle P^{1/2+iq}(T) \rangle_{00}^N W(q) dq$$

liefert alle gesuchten Größen, z. B. die Verteilungsfkt.

$$P_N(q) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} G_N(0, 0, s) e^{sq} ds, \quad \varepsilon > 0$$

N.B.:

$$P_{00}^{1/2+iq}(q) = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}+iq, \frac{1}{2}-iq, 1, -q\right) = P_{-\frac{1}{2}-iq}(1+2q)$$

$P_{00}^{1/2+iq}$: (0,0)-ME der Prinzipalserie

$P_{-\frac{1}{2}-iq}$: konische Fktn. (analyt. Fortsetzung der Legendre-Fktn.)

Problem: $\langle P^{1/2+iq} \rangle^N ?$

Die Cauchy'sche Integralformel

$$A^N = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{z^N}{A-z} dz$$

gilt für alle beschränkte lineare Operatoren A .

Endlichdimensionaler Fall mit Cramer'scher Regel und Residuumsatz einfach zu behandeln.

Unendlichdimensionaler Fall i.a.? Aber

Landauer-Limes und Limes hoher Dichte streng lösbar!

4. Linearer Widerstand?

Matrizen der Jordan - Typen

$$J_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix} \text{ und } J_9 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ergeben lineares, bzw. quadratisches Wachstum.

Jetzt Spieß umdrehen!

Welche Potentiale und/oder Verteilungsfktn. führen auf lineares Wachstum und Konvergenz?

Man beweist:

Kein linearer Widerstand möglich bei reiner Abstands-
mittelung.

Dies wundert nicht, da wir 6 von 10 freien reellen Parametern festgehalten haben. J_2 stellt 4 Bedingungen.

Konvergenz ist dennoch möglich (E&H (82)).

Betrachten wir als nächstes δ -Potentiale stat. variierender Stärke im period. Gitter und Elektronen der Energien $\hbar \cdot \xi = 2\pi n$, $n \in \mathbb{N}$. Dann ist $G_j = \mathbb{1}_j$.

Exponentialdarstellung einführen!

$$A_3 = e^{i\beta Q_3}, \quad A_5 = e^{i\beta Q_5}$$

Die Q -Matrizen sind nilpotent, d. h. $Q_j^3 = 0$.

Ergebnis:

$$\langle g \rangle = (\langle \beta^2 \rangle - \langle \beta \rangle^2) N + \langle \beta \rangle^2 N^2$$

$$\begin{aligned} \langle g^2 \rangle = & [\langle \beta^4 \rangle - 4\langle \beta \rangle \langle \beta^3 \rangle + 12\langle \beta \rangle^2 \langle \beta^2 \rangle - 3\langle \beta^2 \rangle^2 - 6\langle \beta \rangle^4] N \\ & + [4\langle \beta \rangle \langle \beta^3 \rangle + 3\langle \beta^2 \rangle^2 - 18\langle \beta \rangle^2 \langle \beta^2 \rangle + 11\langle \beta \rangle^4] N^2 \\ & + 6\langle \beta \rangle^2 [\langle \beta^2 \rangle - \langle \beta \rangle^2] N^3 \\ & + \langle \beta \rangle^4 N^4 \end{aligned}$$

Linear für $\langle \beta \rangle = 0$ und konvergent für $\langle \beta \rangle \neq 0$!

Das Ergebnis ermutigt, ist aber noch nicht zufriedenstellend.
Was ist zu tun?

In realen phys. Systemen sind Abstand und Potentialform stets (zumindest schwach) korreliert. Eine solche Korrelation erhält die volle Anzahl von 10 freien Parametern und führt auf eine strukturell neue Theorie.

Da sich Abstand und Potentialform kompensieren können, ist davon auszugehen, daß Elektronenergien existieren, die überhaupt nicht merken, daß sie sich in keinem period. Potential befinden.

2. Z. einfachstes Modell: Korrelierte δ -Potentiale

δ -Potentiale in rechte und linke Hälfte aufspalten!

Die zu mittellnde Elementarzelle hat dann die Gestalt

$$\langle e^{i\beta Q} e^{i\hbar\xi\sigma_z} e^{i\beta Q} \rangle$$

Dies scheint die natürliche Formulierung des Problems zu sein!

Eine analytische bzw. halbanalytische Beh. stellt noch aus.

Zusammenfassung:

- Das Problem des Widerstandes bei hohen Dichten ist gelöst.
- Der Weg zur Berechnung aller (bisher) interessierenden Größen ist gewiesen.
- Linearer Widerstand bzw. Erhalt der Bandstruktur ungeordneter Systeme scheint möglich.

Offene Probleme:

- explizites Durchrechnen des Problems korrelierter δ -Potentiale
- Wann folgt aus $\lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_{\rho} = 0$, $\lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_{f(\rho)} = 0$
und

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle f(\rho) \rangle_N = f \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \rho \rangle_N \right) ?$$