Statistische Physik II

03.10.2019

Abweichende Konvention zur Fouriertransformation im Teil „Statistische Physik II":

Fouriertransformation (örtlich) Ortsraum→ k-Raum	$\tilde{y}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x)\, e^{+ikx}\, dx$	Rücktransformation k-Raum → Ortsraum	$y(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{y}(k)\, e^{-ikx}\, dk$
Fouriertransformation (zeitlich) Zeitdarstellung→ Frequenzdarstellung	$\tilde{y}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t)\, e^{+i\omega t}\, dt$	Rücktransformation Frequenzdarstellung → Zeitdarstellung	$y(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{y}(\omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega$

Transport und Kinetik

Kontinuitäts-gleichungen	Eine räumlich und zeitlich variierende Dichte $g(t)$, die mit einer Erhaltungsgröße verbunden ist… $\frac{\partial}{\partial t}\int g(\vec{r},t)\, d^3r = 0$ … erfüllt die Kontinuitätsgleichung… $\frac{\partial g(\vec{r},t)}{\partial t} = -\vec{\nabla}\vec{j}_g(\vec{r},t)$
Fick'sches Gesetz (Teilchenerhaltg.)	$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{\nabla}\vec{j};\ \vec{j} = -D\vec{\nabla}n$ Fouriergesetz (Energieerh.) $c_P\frac{\partial T}{\partial t} = -\vec{\nabla}\vec{j}_Q;\ \vec{j}_Q = -\kappa\vec{\nabla}T$ Viskositätsgesetz (Impulserhaltung) $n_0\frac{\partial (m\vec{u})}{\partial t} = -\vec{\nabla}\underline{\underline{\sigma}};\ \sigma_{zy} = -\eta\frac{d\langle u_y\rangle}{dz}$
1-Teilchen Verteilungsfunktion	$f_1(\vec{r}_1,\vec{p}_1,t) = \langle\sum_{i=1}^{N}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}_i)\,\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_i)\rangle = N\int\rho(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N,\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N,t)\, d^{3(N-1)}r\, d^{3(N-1)}p$
2-Teilchen Verteilungsfunktion	$f_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{p}_1,\vec{p}_2,t) = N(N-1)\int\rho(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N,\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N,t)\, d^{3(N-2)}r\, d^{3(N-2)}p \Longrightarrow$ $(N-1)\, f_1(\vec{r}_1,\vec{p}_1,t) = \int f_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{p}_1,\vec{p}_2,t)\, d^3r_2\, d^3p_2$
s-Teilchen Verteilungsfunktion	$f_s(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_s,\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_s,t) = \frac{N!}{(N-s)!}\int\rho(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N,\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N,t)\, d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p$
Liouville-Gleichung	$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N,\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N,t) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial H}{\partial\vec{r}_i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}_i} - \frac{\partial H}{\partial\vec{p}_i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_i}\right)\rho = \{H,\rho\} = -L^{(N)}\rho$ Hamilton: $H=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i)\right) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}U_{ij}$
Liouville-Operator	$L^{(N)} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\vec{p}_i}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_i} - \frac{\partial V}{\partial\vec{r}_i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}_i}\right) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}\frac{\partial\, U(\vec{r}_i-\vec{r}_j)}{\partial\vec{r}_i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}_i} = L^{(s)} + L^{(N-s)} + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} l_{ij}$ s … beobachtete Teilchen N-s … nicht beobacht. Teilchen
BBGKY Hierarchie	$\frac{\partial}{\partial t}f_s = \frac{N!}{(N-s)!}\int\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p = -\frac{N!}{(N-s)!}\int L^{(N)}\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p$ $\frac{\partial}{\partial t}f_s = -\frac{N!}{(N-s)!}\int\left(L^{(s)} + L^{(N-s)} + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} l_{ij}\right)\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p$ $\frac{\partial}{\partial t}f_s = -L^{(s)}\left(\frac{N!}{(N-s)!}\int\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p\right) - \frac{N!}{(N-s)!}\int\left(L^{(N-s)} + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} l_{ij}\right)\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p$ $\frac{\partial}{\partial t}f_s = -L^{(s)}f_s - \frac{N!}{(N-s)!}\int\left(\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} l_{ij}\right)\rho\left(\underline{r},\underline{p},t\right)d^{3(N-s)}r\, d^{3(N-s)}p$ $\left(\frac{\partial}{\partial t} + L^{(s)}\right)f_s = -\sum_{i=1}^{s}\int l_{i,s+1}f_{s+1}\, d^3r_{s+1}\, d^3p_{s+1}$ … N gekoppelte BWGL
Erste BWGL (Boltzmanngl.)	$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_1} - \frac{\partial V}{\partial\vec{r}_1}\frac{\partial}{\partial\vec{p}_1}\right)f_1(\vec{r}_1,\vec{p}_1,t) = \int l_{12}\, f_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{p}_1,\vec{p}_2,t)\, d^3r_2\, d^3p_2 \Longrightarrow \frac{\partial f_1}{\partial t} - \{H_1,f_1\} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll}$ $\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = \dot{N}_{in} - \dot{N}_{out} = \int[f_2(\vec{r},\vec{r},\vec{p}_1',\vec{p}_2')\, w(\vec{p}_1',\vec{p}_2'\mid\vec{p},\vec{p}_2) - f_2(\vec{r},\vec{r},\vec{p},\vec{p}_2)\, w(\vec{p},\vec{p}_2\mid\vec{p}_1',\vec{p}_2')]\, d^3p_2\, d^3p_1'\, d^3p_2'$ $w(\vec{p}_1',\vec{p}_2'\mid\vec{p},\vec{p}_2) = w(\vec{p},\vec{p}_2\mid\vec{p}_1',\vec{p}_2') \Longrightarrow \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = \int w(\vec{p},\vec{p}_2\mid\vec{p}_1',\vec{p}_2')\, [f_2(\vec{r},\vec{r},\vec{p}_1',\vec{p}_2') - f_2(\vec{r},\vec{r},\vec{p},\vec{p}_2)]\, d^3p_2\, d^3p_1'\, d^3p_2'$
Boltzmannscher Stoßzahlansatz	Vernachlässigung der Korrelationen vor dem Stoß $f_2(\vec{r},\vec{r},\vec{p}_1,\vec{p}_2,t) = f_1(\vec{r},\vec{p}_1,t)\, f_1(\vec{r},\vec{p}_2,t) \Longrightarrow$
Boltzmanngl. mit Stoßzahlansatz	$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} - \frac{\partial V}{\partial\vec{r}}\frac{\partial}{\partial\vec{p}_1}\right)f_1(\vec{r},\vec{p}_1,t) = \int w(\vec{p}_1,\vec{p}_2\mid\vec{p}_1',\vec{p}_2')\, [f_1(\vec{r},\vec{p}_1')\, f_1(\vec{r},\vec{p}_2') - f_1(\vec{r},\vec{p}_1)\, f_1(\vec{r},\vec{p}_2)]\, d^3p_2\, d^3p_1' d^3p_2'$
H-Theorem	$H(t) = \int f_1(\vec{r}_1,\vec{p}_1,t)\ln(f_1(\vec{r}_1,\vec{p}_1,t))d^3r_1d^3p_1 = -\frac{S^{(1)}(t)}{k_B} \Longrightarrow \frac{dH}{dt} \leq 0$ Wärme-leitfähigk $\kappa = \frac{5}{2}\frac{\tau_{rel}n_1T_1k_B^2}{m}$ Strom $j_{Q,x} = -\kappa\frac{\partial T}{\partial x}$
Lokale Gleichgewichtsverteilung	$f_1^{(0)}(\vec{r},\vec{p},t)=n(\vec{r},t)\left(\frac{\beta(\vec{r},t)}{2m\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\beta(\vec{r},t)}{2m}(\vec{p}-m\,\vec{u}(\vec{r},t))^2}$ entspr. lokal Maxwell-Boltzmann-Verteilung plus Drift Maxwell-Boltzmann Verteilung: $f_1(\vec{r},\vec{p}) = ne^{-\beta\left(\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})\right)}$
Relaxationszeit-näherung	$f_1 = f_1^{(0)} + \delta f_1$ … (1) $\Longrightarrow \delta f_1 = f_1 - f_1^{(0)}$ … (2) $\frac{df_1}{dt} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} \overset{(1)}{\Longrightarrow} \frac{d\left(f_1^{(0)}+\delta f_1\right)}{dt} = \left(\frac{\partial\left(f_1^{(0)}+\delta f_1\right)}{\partial t}\right)_{coll} \Big\vert\ \frac{\partial f_1^{(0)}}{\partial t} = 0$ $\frac{d\left(f_1^{(0)}+\delta f_1\right)}{dt} = \left(\frac{\partial\delta f_1}{\partial t}\right)_{coll} \Big\vert\ \frac{d\delta f_1}{dt} \approx 0 \Longrightarrow \frac{df_1^{(0)}}{dt} = \left(\frac{\partial\delta f_1}{\partial t}\right)_{coll} \approx -\frac{\delta f_1}{\tau_{rel}} \overset{(2)}{=} -\frac{f_1-f_1^{(0)}}{\tau_{rel}} \Longrightarrow \frac{\partial f_1^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial f_1^{(0)}}{\partial\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial f_1^{(0)}}{\partial\vec{p}}\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{f_1-f_1^{(0)}}{\tau_{rel}} \Big\vert \cdot\tau_{rel}$ $\tau_{rel}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} + \frac{d\vec{p}}{dt}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)f_1^{(0)} = f_1^{(0)} - f_1 \Longrightarrow f_1 = f_1^{(0)} - \tau_{rel}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} + \frac{d\vec{p}}{dt}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)f_1^{(0)} \Big\vert\ \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$ $f_1 = f_1^{(0)} - \tau_{rel}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} + \vec{F}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)f_1^{(0)} \Big\vert\ \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m};\ \vec{F} = -\vec{\nabla}V = -\frac{\partial V}{\partial\vec{r}} \Longrightarrow \boxed{f_1 = f_1^{(0)} - \tau_{rel}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} - \frac{\partial V}{\partial\vec{r}}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)f_1^{(0)}}$
Erwartungswert	$\langle A\rangle = \frac{1}{n}\iiint_{-\infty}^{\infty} Af_1\, d^3p$ z.B.: $\langle v_x\rangle = \frac{1}{n}\iiint_{-\infty}^{\infty} v_xf_1\, d^3p$
Teilchenstromdichte Richtung x	$\langle N\rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} f_1\, d^3p\, dx\, dy\, dz = \iint_{-\infty}^{\infty} f_1\, d^3p\, dx\, dA = \iint_{-\infty}^{\infty} f_1\, d^3p\, v_x\, dt\, dA \Longrightarrow \langle\frac{dN}{dA\, dt}\rangle = \langle j_{Nx}\rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} v_xf_1\, d^3p$
Stromdichte von A Richtung x	$\langle j_{Ax}\rangle = n\langle Av_x\rangle = n\frac{1}{n}\iiint_{-\infty}^{\infty} Av_xf_1\, d^3p = \frac{1}{m}\iiint_{-\infty}^{\infty} Ap_xf_1\, d^3p$ Achtung! Wenn $A = p$ (Impulsstromdichte), dann Faktor 2 (Impulsübertrag)
Imp.Stromdichte	$\sigma_{ij} = 2n\langle p_iv_j\rangle = 2n\frac{1}{n}\iiint_{-\infty}^{\infty} p_iv_jf_1\, d^3p = 2\frac{1}{m}\iiint_{-\infty}^{\infty} p_ip_jf_1\, d^3p$

Stochastische Prozesse

Random Walk Verteilungs-funktion in 1D	Anzahl Schritte: $M = m_l + m_r$ ... (1) $\xrightarrow{((1)+(2))/2} m_r = \frac{m+M}{2}$ ... (3) $\quad \mathrm{w}(m_r, M) = \binom{M}{m_r} p^{m_r}(1-p)^{m_l}\Big\vert_{p=1/2} \overset{(1)}{\Rightarrow}$ Abw. von Mitte: $m = m_r - m_l$ ... (2) $\mathrm{w}(m_r, M) = \binom{M}{m_r}\left(\frac{1}{2}\right)^{m_r}\left(\frac{1}{2}\right)^{M-m_r} = \binom{M}{m_r}\left(\frac{1}{2}\right)^{M} = \frac{M!}{m_r!(M-m_r)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{M} \overset{(3)}{=} \frac{M!}{\left(\frac{m+M}{2}\right)!\left(M-\frac{m+M}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{M} = \boxed{\frac{M!}{\left(\frac{m+M}{2}\right)!\left(\frac{m-M}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{M}}$ $\langle m\rangle = 2\langle m_r\rangle - M = 2Mp - M = 0;\ \langle m^2\rangle = M \Longrightarrow \sqrt{\langle m^2\rangle} = \sqrt{M}$
Verbundwahrsch.	$\mathrm{w}_n(x_1,t_1;\dots;x_n,t_n) = \langle \delta(x_1 - \mathrm{X}(t_1)) \dots \delta(x_n - \mathrm{X}(t_n))\rangle$ Wahrsch., dass für stoch. Var. $\mathrm{X}(t)$ gilt: $\mathrm{X}(t_1)=x_1$, $\mathrm{X}(t_2)=x_2$, ...
Reduz. Verbundw	$\mathrm{w}_{n-1}(x_1,t_1;\dots;x_{n-1},t_{n-1}) = \int \mathrm{w}_n(x_1,t_1;\dots;x_n,t_n)\,dx_n$
Transferwahrsch.	$\mathrm{w}_n(x_1,t_1;\dots;x_n,t_n) = \mathrm{P}(x_n,t_n \mid x_1,t_1;\dots;x_{n-1},t_{n-1})\,\mathrm{w}_{n-1}(x_1,t_1;\dots;x_{n-1},t_{n-1})$
Purely Random	$\mathrm{P}(x_n,t_n \mid x_1,t_1;\dots;x_{n-1},t_{n-1}) = \mathrm{P}(x_n,t_n)$ Markov-Prozess: $\mathrm{P}(x_n,t_n \mid x_1,t_1;\dots;x_{n-1},t_{n-1}) = \mathrm{P}(x_n,t_n \mid x_{n-1},t_{n-1})$
Übergangsmatrix Matrix-Prozess	$M = \begin{pmatrix} \mathrm{p}(A_n,t_n \mid A_{n-1},t_{n-1}) & \mathrm{p}(A_n,t_n \mid B_{n-1},t_{n-1}) \\ \mathrm{p}(B_n,t_n \mid A_{n-1},t_{n-1}) & \mathrm{p}(B_n,t_n \mid B_{n-1},t_{n-1}) \end{pmatrix}$ $\mathrm{p}(Z_n,t_n \mid S_{n-k},t_{n-k}) = \vec{z}^T M^k \vec{s}$ $\vec{s}$ ... Startvektor $\vec{z}$ ... Zielvektor
Gleichgewichts-verteilg Markov	$\vec{\pi} = \lim_{k\to\infty} M^k \binom{1}{0} = \lim_{k\to\infty} M^k \binom{0}{1}$ alternativ: Löse EWGL $M\vec{\pi} = 1\vec{\pi}$, d.h. finde EV $\vec{\pi}_1$ für EW $\lambda = 1$
Langevin-Kraft	$F(t) = \underbrace{F_{ex}(t)}_{extern} + \underbrace{m\gamma\,\mathrm{v}(t)}_{Reibung} + \underbrace{mA\,\xi(t)}_{stochastisch}$ wobei $\langle\xi(t)\rangle = 0$ (ungerichtet) und $\langle\xi(t)\,\xi(t')\rangle = \delta(t-t')$ (unkorreliert)
Langevin-Gleichung	$\boxed{\dot{v}(t) = -\gamma\,v(t) + A\,\xi(t)} \Longrightarrow \dot{v}(t) + \gamma\,v(t) = A\,\xi(t)$ ... (1) Homogene Lsg: $v_H = v_0 e^{-\gamma t}$ ... (2) Greensche Funktion: $\frac{1}{A}(\partial_t + \gamma)\,v(t) = \xi(t)$ ... (3) $\xrightarrow{Green} \frac{1}{A}(\partial_t + \gamma)\,G(t) \overset{\text{def}}{=} \delta(t)$ Ansatz: $G(t) = c(t)\,e^{-\gamma t}$ ...(4) $\overset{(3)}{\Rightarrow}$ $\frac{1}{A}(\dot{c}(t)\,e^{-\gamma t} - \gamma\,c(t)\,e^{-\gamma t} + \gamma\,c(t)\,e^{-\gamma t}) = \delta(t) \Rightarrow \dot{c}(t)\,e^{-\gamma t} = A\,\delta(t) \Rightarrow c(t) = A\int_{t_0}^{t}\delta(t)\,dt = \theta(t) \overset{(1)}{\Rightarrow} \boxed{G(t) = A\,\theta(t)\,e^{-\gamma t}}$..(5) Partikulärlösung mit Green: $v_P(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(t-\tau)\,\xi(\tau)\,d\tau \overset{(5)}{=} A\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau$ ... (6) Gesamtlösung: $v(t) = v_H(t) + v_P(t) \xrightarrow{(2)(6)} \boxed{v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + A\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau}$
$\langle v(t)\rangle$	$\langle v(t)\rangle = \langle v_0 e^{-\gamma t}\rangle + A\langle\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau\rangle = v_0 e^{-\gamma t} + A\int_0^{t'} e^{-\gamma(t-\tau)}\langle\xi(\tau)\rangle\,d\tau$ $\langle\xi(t)\rangle=0 \Longrightarrow \boxed{\langle v(t)\rangle = v_0 e^{-\gamma t}}$
$\langle v(t)\,v(t')\rangle$	$\langle v(t)\,v(t')\rangle = \langle\left(v_0 e^{-\gamma t} + A\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau\right)\left(v_0 e^{-\gamma t'} + A\int_0^{t'} e^{-\gamma(t'-\tau')}\,\xi(\tau')\,d\tau'\right)\rangle$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = \langle v_0^2 e^{-\gamma t}e^{-\gamma t'}\rangle + \langle A^2\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau\int_0^{t'} e^{-\gamma(t'-\tau')}\,\xi(\tau')\,d\tau'\rangle +$ $\langle v_0 e^{-\gamma t}A\int_0^{\infty} e^{-\gamma(t'-\tau')}\,\xi(\tau')\,d\tau'\rangle + \langle v_0 e^{-\gamma t'}A\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\,\xi(\tau)\,d\tau\rangle$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2\int_0^t\int_0^{t'} e^{-\gamma(t'-\tau')}e^{-\gamma(t-\tau)}\langle\xi(\tau')\,\xi(\tau)\rangle\,d\tau'\,d\tau +$ $v_0 e^{-\gamma t}A\int_0^{\infty} e^{-\gamma(t'-\tau')}\langle\xi(\tau')\rangle\,d\tau' + v_0 e^{-\gamma t'}A\int_0^t e^{-\gamma(t-\tau)}\langle\xi(\tau)\rangle\,d\tau$ $\langle\xi(\tau)\rangle = 0; \langle\xi(\tau)\,\xi(\tau')\rangle = \delta(\tau-\tau')$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2\int_0^t\int_0^{t'} e^{-\gamma(t'-\tau')}e^{-\gamma(t-\tau)}\,\delta(\tau-\tau')\,d\tau'\,d\tau$ Ann: $t \geq t'$: $d\tau$-Integral mit δ auflösen $\tau \to \tau'$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2\int_0^{t'} e^{-\gamma(t'-\tau')}e^{-\gamma(t-\tau')}\,d\tau' = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2\int_0^{t'} e^{-\gamma t'}e^{\gamma\tau'}e^{-\gamma t}e^{\gamma\tau'}\,d\tau'$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2 e^{-\gamma(t+t')}\int_0^{t'} e^{2\gamma\tau'}\,d\tau' = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2 e^{-\gamma(t+t')}\frac{1}{2\gamma}e^{2\gamma\tau'}\Big\vert_0^{t'}$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2 e^{-\gamma t}e^{-\gamma t'}\frac{1}{2\gamma}\left(e^{2\gamma t'} - 1\right) = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + A^2\frac{1}{2\gamma}\left(e^{-\gamma t+\gamma t'} - e^{-\gamma t}e^{-\gamma t'}\right)$ $\langle v(t)\,v(t')\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + \frac{A^2}{2\gamma}\left(e^{-\gamma(t-t')} - e^{-\gamma(t+t')}\right)$ $\boxed{\langle v(t)\,v(t')\rangle = \left(v_0^2 - \frac{A^2}{2\gamma}\right)e^{-\gamma(t+t')} + \frac{A^2}{2\gamma}e^{-\gamma(t-t')}}$ für $t \geq t'$, analog: $\boxed{\langle v(t)\,v(t')\rangle = \left(v_0^2 - \frac{A^2}{2\gamma}\right)e^{-\gamma(t+t')} + \frac{A^2}{2\gamma}e^{-\gamma\vert t-t'\vert}}$ für $t \leq t'$
$\langle v^2(t)\rangle$	$\langle v^2(t)\rangle = \langle v(t)\,v(t)\rangle = \left(v_0^2 - \frac{A^2}{2\gamma}\right)e^{-\gamma(t+t)} + \frac{A^2}{2\gamma}e^{-\gamma(t-t)} = \left(v_0^2 - \frac{A^2}{2\gamma}\right)\frac{1}{e^{2\gamma t}} + \frac{A^2}{2\gamma} \xrightarrow{t\to\infty} \boxed{\langle v^2(t)\rangle \xrightarrow{t\to\infty} \frac{A^2}{2\gamma}}$
Fluktuations-Diss-ipations-Theorem	Gleichverteilungssatz: $\frac{m\langle v^2(t)\rangle}{2} = \frac{k_B T}{2} \Longrightarrow m\frac{A^2}{2\gamma} = k_B T \Longrightarrow \boxed{A^2 = \frac{2\gamma k_B T}{m}}$ A^2 ... Beschleunigungsfluktuationen $2\gamma k_B T/m$ ... dissipative Kraft (Reibung)
Ito-Prozess	$\boxed{\dot{X}(t) = \nu(X(t),t) + \sigma(X(t),t)\,\xi(t)}$ Erste Ordnung, entspricht Markov-Prozess (kann sich an einen Schritt erinnern) $\xi(t)$ stochastisch, $\langle\xi(t)\rangle = 0;\ \langle\xi(t)\,\xi(t')\rangle = \delta(t-t') \Longrightarrow$ generiert Wiener Prozess.
Wiener Inkrement $\Delta W(t_i)$, $dW(t_i)$	$\Delta X(t_i) = X(t_i + \Delta t) - X(t_i) = X(s)\vert_{t_i}^{t_i+\Delta t} = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\dot{X}(s)\,ds$ $\Delta X(t_i) = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\nu(X,s)\,ds + \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\sigma(X,s)\,\xi(s)\,ds \approx \nu(X,t_i)\,\Delta t + \sigma(X,t_i)\int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\xi(s)\,ds \Longrightarrow$ $\boxed{\Delta X(t_i) \approx \nu(X,t_i)\,\Delta t + \sigma(X,t_i)\,\Delta W(t_i)}$ ... (1) mit $\boxed{\Delta W(t_i) = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\xi(s)\,ds;\ \langle\Delta W(t_i)\rangle = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\langle\xi(s)\rangle\,ds = 0}$ $\langle\Delta W(t_i)\,\Delta W(t_j)\rangle = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\int_{t_j}^{t_j+\Delta t}\langle\xi(s)\,\xi(s')\rangle\,ds\,ds' = \int_{t_i}^{t_i+\Delta t}\int_{t_j}^{t_j+\Delta t}\delta(s-s')\,ds\,ds' = \delta_{ij}\int_{t_i}^{t_i+\Delta t}ds = \delta_{ij}\Delta t$ ... (2) $(dW)^2 = \lim_{\Delta W\to dW}\langle\Delta W(t)\,\Delta W(t)\rangle \overset{(2)}{=} dt \Longrightarrow \boxed{dW^2 = dt;\ dW = \sqrt{dt}}$ ... (3) (1) $\xrightarrow{\Delta t\to dt} \boxed{dX(t) = \nu(X,t)\,dt + \sigma(X,t)\,dW(t) \overset{(3)}{=} \nu(X,t)\,dt + \sigma(X,t)\sqrt{dt}}$ ΔW ... gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz Δt
Ito's Lemma	Gegeben SDG: $dX(t) = \nu(X,t)\,dt + \sigma(X,t)\,dW(t)$ ... (1) Neue Variable: $Y = f(x) \Longrightarrow$ $Y(t+dt) = Y(t) + dY(t) = Y(t) + f'(X)\,dX + \frac{1}{2}f''(X)\,dX^2 \Longrightarrow dY(t) = f'(X)\,dX + \frac{1}{2}f''(X)\,dX^2 \overset{(1)}{\Rightarrow}$ $dY(t) = f'(X)\,(\nu\,dt + \sigma\,dW) + \frac{1}{2}f''(X)\,dX^2$ $dX^2 = \nu^2\,dt^2 + \nu\sigma\,dt\,dW + \sigma^2\,dW^2 = \sigma^2\,dt$ $dY(t) = f'(X)\,(\nu\,dt + \sigma\,dW) + \frac{1}{2}f''(X)\,\sigma^2\,dt$ Neue SDG: $\boxed{dY(t) = \underbrace{\left(f'(X)\,\nu(X,t) + \frac{1}{2}f''(X)\,\sigma^2(X,t)\right)}_{\tilde{\nu}}dt + \underbrace{f'(X)\,\sigma(X,t)}_{\tilde{\sigma}}dW}$

Fockker-Planck-Gleichung	Gegeben SDG (Ito-Prozess): $\dot X(t) = \nu(X(t),t) + \sigma(X(t),t)\,\xi(t) \Longrightarrow$ überführen in part. DGL für Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(X,t) \Longrightarrow \boxed{\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X}(\nu\, w) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}(\sigma^2\, w)}$ folgt aus Kramers-Moyal Expansion $\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\partial}{\partial X}\right)^n (D_n w)$ mit Sprungmomenten $D_n = \lim_{\tau\to 0}\frac{1}{\tau}\frac{M_n}{n!}$ und Pawula-Theorem $D_n = 0\, \forall\, n>2 \Longrightarrow D_1 = \nu(X(t),t)$ ... Drift-Term; $D_2 = \frac{1}{2}\sigma^2$ ... Diffusions-Term
Sprungmomente	$D_1 = \nu(X(t),t) = \lim_{\tau\to0}\left(\frac{\langle X(t+\tau)-X(t)\rangle}{\tau}\right)$ ... Drift-Term; $D_2 = \frac{1}{2}\sigma^2 = \frac{1}{2}\lim_{\tau\to0}\left(\frac{\langle (X(t+\tau)-X(t))^2\rangle}{\tau}\right)$ ... Diffusions-Term
Diffusionskonst.	$D = D_2$. Wenn $\langle X(t)\rangle = 0$ dann $D = \lim_{t\to\infty}\frac{\langle x^2(t)\rangle}{2t}$
Maxwell-Boltzmann Verteilung mit Fokker-Planck-Gleichung herleiten	Langevin $\underbrace{\dot v(t)}_{\dot X} = \underbrace{-\gamma\, v(t)}_{\nu} + \underbrace{A}_{\sigma}\,\xi(t)$ einsetzen in $\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X}(\nu\, w) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}(\sigma^2\, w) \Longrightarrow \frac{\partial w}{\partial t} = \gamma\frac{\partial(vw)}{\partial v} + \frac{A^2}{2}\frac{\partial^2 w}{\partial v^2} \Big\| A^2 = \frac{2\gamma k_B T}{m}$ $\frac{\partial w}{\partial t} = \gamma\frac{\partial (vw)}{\partial v} + \frac{\gamma k_BT}{m}\frac{\partial^2 w}{\partial v^2}$ statische Lsg. $\Longrightarrow \frac{\partial w}{\partial t} = 0 \Longrightarrow \gamma\frac{\partial(vw_\infty)}{\partial v} + \frac{\gamma k_BT}{m}\frac{\partial^2 w_\infty}{\partial v^2} = 0 \Longrightarrow \gamma\frac{\partial}{\partial v}\left(vw_\infty + \frac{k_BT}{m}\frac{\partial w_\infty}{\partial v}\right) = 0 \Longrightarrow$ $vw_\infty + \frac{k_BT}{m}w'_\infty = C$ nur lösbar für $C = 0 \Longrightarrow vw_\infty + \frac{k_BT}{m}\frac{\partial w_\infty}{\partial v} = 0 \Longrightarrow \frac{k_BT}{m}\frac{\partial w_\infty}{\partial v} = -vw_\infty \Longrightarrow$ $\frac{\partial w_\infty}{\partial v} = -\frac{m}{k_BT}vw_\infty \Longrightarrow \frac{1}{w_\infty}dw_\infty = -\frac{m}{k_BT}vdv \Longrightarrow \int\frac{1}{w_\infty}dw_\infty = -\frac{m}{k_BT}\int vdv \Longrightarrow \ln(w_\infty) = -\frac{m}{k_BT}\frac{1}{2}v^2 + \tilde c \Longrightarrow$ $w_\infty = e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}+\tilde c} \Longrightarrow w_\infty = ce^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} \Longrightarrow c\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} \overset{!}{=} 1 \Longrightarrow \boxed{w_\infty = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_BT}}\,e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}}$
Charakteristische Funktion (CF)	Die charakteristische Funktion $c(k)$ ist die FT der Wahrscheinlichkeitsdichte $w(X)$: $\boxed{c(k) = \int_{-\infty}^{\infty} w(X)\,e^{+ikX}\,dX}$ Die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(X)$ ist die Rücktransformation der char. Fkt. $c(k)$: $\boxed{w(X) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} c(k)\,e^{-ikx}\,dk}$.
Isserlis: $\langle x^k(t)\rangle$ aus Charakter-istischer Funktion bzw. aus Green-Funktion	$c(k) = \int_{-\infty}^{\infty} w(X)\,e^{ikX}\,dX = \int_{-\infty}^{\infty} w(X)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ikX)^n}{n!}dX = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ik)^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty} X^n\, w(X)\,dX \Longrightarrow$ $c(k) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ik)^n}{n!}\langle X^n\rangle$; i.A. $\langle X^{2n+1}\rangle = 0 \Longrightarrow \boxed{c(k) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ik)^{2n}}{(2n)!}\langle X^{2n}\rangle;\ c(k) = c_0e^{\alpha k} = c_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha k)^n}{n!}}$ Beim gedämpften harmonischen Oszillator mit stochastischer treibender Kraft: $\ddot x + \gamma\dot x + \omega_0^2 x = A\,\xi(t)$ Stationäre Lösung mit Green: $x(t) = \int_{-\infty}^{t} G(t-\tau)\,\xi(\tau)\,d\tau$ mit $G(\Delta t) = Ae^{-\frac{\gamma}{2}\Delta t}\sin(\omega_1\Delta t)/\omega_1$ und $4\omega_1^2 = 4\omega_0^2 - \gamma^2$ $\langle X^{2n}\rangle = \frac{(2n)!}{n!2^n}\left(\int_{-\infty}^{t} G^2(t-\tau)\,d\tau\right)^n \Big\| t' \overset{\text{def}}{=} -\tau \Longrightarrow \langle X^{2n}\rangle = \frac{(2n)!}{n!2^n}\left(-\int_{\infty}^{-t} G^2(t+t')\,dt'\right)^n \Longrightarrow$ $\langle X^{2n}\rangle = \frac{(2n)!}{n!2^n}\left(\int_{-t}^{\infty} G^2(t+t')\,dt'\right)^n \Big\| t' = \tau - t \Longrightarrow \langle X^{2n}\rangle = \frac{(2n)!}{n!2^n}\left(\int_{0}^{\infty} G^2(\tau)\,d\tau\right)^n$ mit $\int_0^\infty G^2(\tau)\,d\tau = \frac{A^2}{2\omega_0^2\gamma}$

Lineare Antworttheorie (Linear Response Theory)

Grundlagen	Eine Responsefunktion $\chi(t,t')$ beschreibt über ein Faltungsintegral, wie sich eine Systemgröße $x(t)$ nach einer Störung $s(t')$ entwickelt: $x(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\chi(t,t')\,s(t')\,dt'$. Aufgrund Kausalität muss gelten: $\chi(t,t') = \Theta(t-t')\,f(t,t')$ D.h.: Die Störung $s(t')$ kann auf $x(t)$ immer nur Auswirkungen für Zeitpunkte $t \geq t'$ haben $\Longrightarrow$ $x(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\Theta(t-t')\,f(t,t')\,s(t')\,dt' = \int_{-\infty}^{t} f(t,t')\,s(t')\,dt'$. Annahme: Das System ist Anfangs im Gleichgewicht. Dann gilt: Wie sich der Wert der Störung $s(t')$ auf die Systemgröße $x(t)$ zum Zeitpunkt $t \geq t'$ auswirkt, hängt nur von der Zeitdifferenz $\Delta t = t - t' \geq 0$ ab: $\chi(t,t') = \chi(t-t') = \chi(\Delta t)$. Es gilt (Kausalität): $\chi(\Delta t) = 0\ \forall\, \Delta t < 0$
Beweis: Keine Residuen in oberer Halbebene	Sei $\Delta t < 0$ ... (1). Dann gilt wegen Kausalität: $\chi(\Delta t) = 0$ ... (2) Fourierrücktrafo: $\chi(\Delta t) \overset{\text{def}}{=} \chi(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde\chi(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega \overset{(1)}{=} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde\chi(\omega)\,e^{i\omega\|t\|}\,d\omega \overset{(2)}{=} 0$ Residuensatz: Integration über oberen Halbkreis (OHK) harmlos, weil $\lim_{\mathrm{Im}(\omega)\to\infty}\int_{OHK}\tilde\chi(\omega)\,e^{i\omega\|t\|}\,d\omega = \lim_{\mathrm{Im}(\omega)\to\infty}\int_{OHK}\tilde\chi(\omega)\,e^{i(\mathrm{Re}(\omega)+i\,\mathrm{Im}(\omega))\|t\|}\,d\omega =$ $\lim_{\mathrm{Im}(\omega)\to\infty}\int_{OHK}\tilde\chi(\omega)\,e^{i\,\mathrm{Re}(\omega)\|t\|}\,\underbrace{e^{-\mathrm{Im}(\omega)\|t\|}}_{\to 0}\,d\omega = 0 \Longrightarrow \chi(t) = \frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\tilde\chi(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{OHK}\tilde\chi(\omega)\,e^{i\omega\|t\|}\,d\omega\right) = 0 + 0$
z.B. dielektrische Polarisation	$P(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\chi_e(t-t')\,E(t')\,dt'$ Im Frequenzraum lineare Beziehung: $\tilde P(\omega) = \tilde\chi_e(\omega)\,\tilde E(\omega)$
Lorentz-Modell für lineare dielektrische Suzeptibilität	$\ddot x + \gamma\dot x + \omega_0^2 x = \frac{e}{m}E \Longrightarrow$ jeden Term ausdrücken als Rücktransformation aus dem Frequenzraum $\frac{1}{2\pi}\frac{d^2}{dt^2}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega + \frac{1}{2\pi}\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\gamma\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega_0^2\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e}{m}\tilde E(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega$ $\frac{d^2}{dt^2}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega + \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\gamma\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\omega_0^2\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega = \frac{e}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde E(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega$ $\int_{-\infty}^{\infty}\tilde x(\omega)\frac{d^2}{dt^2}e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\gamma\,\tilde x(\omega)\frac{d}{dt}e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\omega_0^2\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega = \frac{e}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde E(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega$ $\int_{-\infty}^{\infty}\tilde x(\omega)\,(-\omega^2)e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\gamma\,\tilde x(\omega)\,(-i\omega)e^{-i\omega t}\,d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\omega_0^2\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega = \frac{e}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde E(\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega$ $\tilde x(\omega)\,(-\omega^2)e^{-i\omega t} + \gamma\,\tilde x(\omega)\,(-i\omega)e^{-i\omega t} + \omega_0^2\,\tilde x(\omega)\,e^{-i\omega t} = \frac{e}{m}\tilde E(\omega)\,e^{-i\omega t}$ $-\omega^2\,\tilde x(\omega) - i\omega\gamma\,\tilde x(\omega) + \omega_0^2\,\tilde x(\omega) = \tilde x(\omega)\,(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma) = \frac{e}{m}\tilde E(\omega) \Longrightarrow \tilde x(\omega) = \frac{e}{m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-i\omega\gamma}\tilde E(\omega)$ ... (1) $\tilde P(\omega) = ne\,\tilde x(\omega) \overset{(1)}{\Longrightarrow} \tilde P(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-i\omega\gamma}\tilde E(\omega)$ ... (2) $\tilde\chi(\omega) = \frac{\tilde P(\omega)}{\tilde E(\omega)} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{\tilde\chi(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-i\omega\gamma}}$ ... (3) $\tilde\chi(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{(\omega_0^2-\omega^2)-i\omega\gamma}\cdot\frac{(\omega_0^2-\omega^2)+i\omega\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)+i\omega\gamma} = \frac{ne^2}{m}\frac{(\omega_0^2-\omega^2)+i\omega\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)^2-\omega^2\gamma^2} \overset{\text{def}}{=} \tilde\chi_r(\omega) + i\,\tilde\chi_i(\omega) \Longrightarrow$ $\boxed{\tilde\chi_r(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{(\omega_0^2-\omega^2)}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}\quad \tilde\chi_i(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{\omega\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}}$

Reaktiver und dissipativer Anteil	Wenn $\chi(t) \in \mathbb{R}$: $\boxed{\tilde{\chi}_r(\omega) = \tilde{\chi}_r(-\omega)}$ ... reaktiver Anteil; $\boxed{\tilde{\chi}_i(\omega) = -\tilde{\chi}_i(-\omega)}$...dissipativer Anteil. Beweis: $\tilde{\chi}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\, e^{i\omega t}\, dt = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\,(\cos(\omega t) + i\sin(\omega t))\, dt = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\cos(\omega t)\, dt + i\int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\sin(\omega t)\, dt \Longrightarrow$ $\tilde{\chi}_r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\cos(\omega t)\, dt$ ... (1) $\Longrightarrow \tilde{\chi}_r(-\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\cos(-\omega t)\, dt = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\cos(\omega t)\, dt \overset{(1)}{=} \tilde{\chi}_r(\omega)$ ■ $\tilde{\chi}_i(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\sin(\omega t)\, dt$ ... (2) $\Longrightarrow \tilde{\chi}_i(-\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\sin(-\omega t)\, dt = -\int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\sin(-\omega t)\, dt \overset{(2)}{=} -\tilde{\chi}_i(-\omega)$ ■
Kramers-Kronig-Relationen	Wir betrachten die Funktion $\frac{1}{i\pi}\oint_C \frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-(\omega-i\varepsilon)}d\omega'$. Wenn $\tilde{\chi}(\omega)$ im Unendlichen schneller abfällt als $\frac{1}{\omega}$, dann gilt: $0 = \frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-(\omega-i\varepsilon)}d\omega' = \frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{(\omega'-\omega)+i\varepsilon}d\omega' \Big\vert\ \omega'-\omega \overset{\text{def}}{=} \alpha \Longrightarrow \frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\alpha+i\varepsilon}d\omega' = 0 \Big\vert\ \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\alpha+i\varepsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{\alpha} - i\pi\,\delta(\alpha)$ $\frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\mathcal{P}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\alpha} - i\pi\,\tilde{\chi}(\omega')\,\delta(\alpha)\right)d\omega' = \frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\mathcal{P}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-\omega} - i\pi\,\tilde{\chi}(\omega')\,\delta(\omega'-\omega)\right)d\omega' = 0$ $\frac{1}{i\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' - \int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\chi}(\omega')\,\delta(\omega'-\omega)\,d\omega' = 0 \Longrightarrow \frac{1}{i\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' - \tilde{\chi}(\omega) = 0 \Longrightarrow$ $\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{i\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{-i\tilde{\chi}(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' \Longrightarrow \tilde{\chi}_r(\omega) + i\,\tilde{\chi}_i(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{-i(\tilde{\chi}_r(\omega')+i\,\tilde{\chi}_i(\omega'))}{\omega'-\omega}d\omega' \Longrightarrow$ $\tilde{\chi}_r(\omega) + i\,\tilde{\chi}_i(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}_i(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' - i\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}_r(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' \Longrightarrow$ $\boxed{\tilde{\chi}_r(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}_i(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega';\ \ \tilde{\chi}_i(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\tilde{\chi}_r(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega'}$ mit $\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' = \lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{f(\omega')-f(\omega)}{\omega'-\omega}d\omega'$
Verallgemeinerte Suszeptibilität QM	$\boxed{\chi_{BA}(t-t') = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\,\langle[\hat{A}_I(t'),\hat{B}_I(t)]\rangle_0 = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\,\langle[\hat{A}_I(0),\hat{B}_I(t-t')]\rangle_0}$ $\boxed{\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\langle[\hat{A}_I(0),\hat{B}_I(t)]\rangle_0}$ mit $\langle[\hat{A}_I(t'),\hat{B}_I(t)]\rangle_0 \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\big(\rho_0[\hat{A}_I(t'),\hat{B}_I(t)]\big)$ Es gilt: $\boxed{\chi_{BA} = -\chi_{BA}}$
QM Fluktuations-Dissipations-theorem	Korrelationsfunktion $C_{BA}(t) = \langle\hat{A}_I(t')\,\hat{B}_I(t+t')\rangle_0 = \langle\hat{A}_I(0)\,\hat{B}_I(t)\rangle_0 \Longrightarrow$ Suszeptibilität $\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\langle[\hat{A}_I(0),\hat{B}_I(t)]\rangle_0 = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\langle\hat{A}_I(0)\,\hat{B}_I(t) - \hat{B}_I(t)\,\hat{A}_I(0)\rangle_0 = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\,\langle C_{BA}(t) - C_{AB}(-t)\rangle_0$ Falls $C_{BA} \in \mathbb{R}$: Fluktuationen... $\tilde{C}_{BA}(\omega) = \frac{2\hbar}{1-e^{\beta\hbar\omega}}\mathrm{Im}(\tilde{\chi}_{BA}(\omega))$ ...Dissipation $\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = \beta\int_0^{\infty}\langle\dot{\hat{A}}_I(t)\big\vert_{t=0}\,\hat{B}_I(t)\rangle_0\, e^{i\omega t}\, dt$
Klass. FT-Theorem	Fluktuationen... $\tilde{C}_{BA}(\omega) = \frac{2k_BT}{\omega}\mathrm{Im}(\tilde{\chi}_{BA}(\omega))$ ...Dissipation
Autokorrelationsfunktion (klassisch)	Autokorrelationsfunktion $C_{YY}(t) = \langle Y(t')\,Y(t+t')\rangle$ Geg.: DGL $c_1\,\dot{x}(t+t') + c_2\,x(t+t') = c_3\,\xi(t+t')$ Autokorrelationsfunktion C_{xx} löst homogene DGL für $\Delta t > 0 \Longrightarrow$ z.B.: $C_{xx} = C_0 e^{-\frac{c_2}{c_1}t}$ Randbedingungen: $C_{xx}(0) = \langle x^2(0)\rangle$; $\dot{C}_{xx}(0) = 0$
Wiener-Chinchin (Spektrale Leistungsdichte)	Die zur Autokorrelationsfunktion $C_{YY}(t) = \langle Y(t'), Y(t+t')\rangle$ gehörige Fouriertransformation $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ $\tilde{C}_{YY}(\omega) = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left\lvert\int_T Y(t)\,e^{i\omega t}\,dt\right\rvert^2 = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left\lvert\tilde{Y}_T(\omega)\right\rvert^2$ (Wiener-Chinchin-Theorem)
Beispiel Berechnung Spektrale Leistungsdichte aus stochastischer DGL mittels Wiener-Chinchin Theorem	$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = A\,\xi(t) \vert e^{i\omega t} \Longrightarrow \ddot{x}e^{i\omega t} + \gamma\dot{x}e^{i\omega t} + \omega_0^2 x e^{i\omega t} = A\,\xi(t)\,e^{i\omega t} \Big\vert \int_T dt \Longrightarrow$ $\int_T \ddot{x}e^{i\omega t}\,dt + \gamma\int_T \dot{x}e^{i\omega t}\,dt + \omega_0^2\int_T x e^{i\omega t}\,dt = A\int_T \xi(t)\,e^{i\omega t}\,dt \Big\vert \int_T A(t)\,e^{i\omega t}\,dt = \tilde{A}_T(\omega)$ $I_2 + \gamma I_1 + \omega_0^2\,\tilde{x}_T(\omega) = A\,\tilde{\xi}_T(\omega)$ ... (1) $I_1 = \int_T \dot{x}e^{i\omega t}\,dt \overset{\text{def}}{=} \int_T \dot{f}g\,dt \Big\vert \dot{f} \overset{\text{def}}{=} \dot{x}, f = x, g = e^{i\omega t}, \dot{g} = i\omega e^{i\omega t} \Longrightarrow$ $I_1 = fg\vert_T - \int_T f\dot{g}\,dt = x(t)\,e^{i\omega t}\big\vert_T - i\omega\int_T x e^{i\omega t}\,dt \Big\vert x(t)\,e^{i\omega t}\big\vert_T \approx 0$ (Randterm), $\int_T x e^{i\omega t}\,dt = \tilde{x}_T(\omega)$ $I_1 = -i\omega\,\tilde{x}_T(\omega)$ ... (2) $\overset{(1)}{\Rightarrow} I_2 - i\gamma\omega\,\tilde{x}_T(\omega) + \omega_0^2\,\tilde{x}_T(\omega) = A\,\tilde{\xi}_T(\omega)$ ... (3) $I_2 = \int_T \ddot{x}e^{i\omega t}\,dt \overset{\text{def}}{=} \int_T \dot{f}g\,dt \Big\vert \dot{f} \overset{\text{def}}{=} \ddot{x}, f = \dot{x}, g = e^{i\omega t}, \dot{g} = i\omega e^{i\omega t} \Longrightarrow I_2 = fg\vert_T - \int_T f\dot{g}\,dt$ $I_2 = \dot{x}(t)\,e^{i\omega t}\big\vert_T - i\omega\int_T \dot{x}e^{i\omega t}\,dt \Big\vert \dot{x}(t)\,e^{i\omega t}\big\vert_T \approx 0$ (Randterm), $\int_T \dot{x}e^{i\omega t}\,dt = I_1 \overset{(2)}{=} -i\omega\,\tilde{x}_T(\omega) \Longrightarrow$ $I_2 = -\omega^2\,\tilde{x}_T(\omega)$ ... (4) $\overset{(3)}{\Rightarrow} -\omega^2\,\tilde{x}_T(\omega) - i\gamma\omega\,\tilde{x}_T(\omega) + \omega_0^2\,\tilde{x}_T(\omega) = A\,\tilde{\xi}_T(\omega) \Longrightarrow$ $(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)\,\tilde{x}_T(\omega) = A\,\tilde{\xi}_T(\omega) \vert \lvert\ldots\rvert^2 \Longrightarrow ((\omega_0^2-\omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2)\lvert\tilde{x}_T(\omega)\rvert^2 = A^2\left\lvert\tilde{\xi}_T(\omega)\right\rvert^2 \Longrightarrow$ $\lvert\tilde{x}_T(\omega)\rvert^2 = \frac{A^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}\left\lvert\tilde{\xi}_T(\omega)\right\rvert^2$ ... (5) Wiener-Chinchin: $\tilde{C}_{xx}(\omega) = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\lvert\tilde{x}_T(\omega)\rvert^2 \overset{(5)}{\Rightarrow}$ $\tilde{C}_{xx}(\omega) = \frac{A^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}\lim_{T\to\infty}\frac{\left\lvert\tilde{\xi}_T(\omega)\right\rvert^2}{T} = \frac{A^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}\tilde{C}_{\xi\xi}(\omega) \Big\vert \tilde{C}_{\xi\xi}(\omega) = 1 \Longrightarrow \boxed{\tilde{C}_{xx}(\omega) = \frac{A^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}}$
Green-Kubo	$\sigma(\omega) = \frac{L}{A}\frac{1}{k_BT}\int_0^{\infty}\langle\hat{J}_I(0)\,\hat{J}_I(t)\rangle_0 e^{i\omega t}\,dt = \frac{L}{A}\frac{1}{k_BT}\int_0^{\infty}c_{jj}(t)\,e^{i\omega t}\,dt$ σ ...Leitfähigkeit, L ... Leiterlänge, A ... Leiterquerschnitt
Drude	$\boxed{\frac{d}{dt}J(t) + \gamma\,J(t) = \frac{ne^2}{m}E(t)} \Longrightarrow \tilde{J}(\omega) = \frac{1}{\gamma-i\omega}\frac{ne^2}{m}\tilde{E}(\omega)$ vgl. $\boxed{\tilde{J}(\omega) = \tilde{\sigma}(\omega)\,\tilde{E}(\omega)} \Longrightarrow$ $\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\gamma-i\omega}, \mathrm{Re}(\tilde{\sigma}(\omega)) = \frac{ne^2}{m}\frac{\gamma}{\gamma^2+\omega^2} = \frac{L}{AR_0}\frac{\gamma}{\gamma^2+\omega^2}$ mit $R_0 = \frac{m}{ne^2}\frac{L}{A}\gamma$ Außerdem gilt: $\tilde{\chi}_{JD}(\omega) = A\,\tilde{\sigma}(\omega)$

Maxwell-Relationen

S **U** $\vec{\mathcal{M}}$ $\mathbf{H_m}$ $\mathbf{F_m}$ $\vec{B}_{ext}$ $\mathbf{G_m}$ T	Und mancher Fysiker trinkt gerne Bier hinterm Schreibtisch	Annahme: V=const. Ecken: nat. Variable Seitenmitt.: Potentiale z.B.: $G_m = G_m(\vec{B}_{ext}, T, N)$	Bsp. Mitte- Ecke- Ecke:	$\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{\mathcal{M}}}\right)_{T,V} = \vec{B}_e$ $\left(\frac{\partial G}{\partial \vec{B}_e}\right)_{T,V} = -\vec{\mathcal{M}}$

Thermodynamische Potentiale (ohne Magnetismus)

Allgemein	1.HS: $dE = \delta Q + \delta W \Longrightarrow \delta Q = dE - \delta W \mid \delta W = -p\,dV + \mu\,dN \Longrightarrow \delta Q = dE + p\,dV - \mu\,dN$ … (1) 2.HS: $dS \geq \frac{\delta Q}{T} \Longrightarrow T\,dS \geq \delta Q \overset{(1)}{\Longrightarrow} T\,dS \geq dE + p\,dV - \mu\,dN \Longrightarrow 0 \geq dE + p\,dV - T\,dS - \mu\,dN \Longrightarrow$ $\boxed{dE + p\,dV - T\,dS - \mu\,dN \leq 0}$ … (2)
Entropie S	Situation: Isoliertes Gefäß mit konstanter Energie und konstantem Volumen: $\boxed{dE = 0, dV = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow} -T\,dS \leq 0 \Longrightarrow$ $\boxed{dS \geq 0}$ Natürliche Variablen: $\boxed{S = S(E, V, N)}$
Innere Energie E	Situation: Isoliertes Gefäß mit konstanter (gegebener) Entropie und konstantem Volumen $\boxed{dS = 0, dV = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow}$ $\boxed{dE \leq 0}$ Achtung: Das isolierte System hat natürlich eine konstante Energie. Die Aussage $dE \leq 0$ ist im Sinne einer Variationsrechnung zu verstehen: Unter allen Zuständen mit gegebener Entropie S und Volumen V besitzt der Gleichgewichtszustand die minimale innere Energie E. Natürliche Variablen: $\boxed{E = E(S, V, N)}$, weil $dE = \delta Q + \delta W \Longrightarrow$ $\boxed{dE = T\,dS - p\,dV + \mu\,dN = d(TS - pV + \mu N) \leq 0}$ … (3) $\boxed{E = TS - pV + \mu N}$
Enthalpie H	Situation: Zylinder mit Kolben mit konstanter (gegebener) Entropie: $\boxed{dS = 0, dp = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow}$ $\boxed{dH = dE + p\,dV = d(E + pV) \leq 0}$ Natürliche Variablen: $\boxed{H = H(S, p, N)}$, weil $\boxed{H = E + pV} \Longrightarrow dH = dE + p\,dV + V\,dp \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $dH = T\,dS - p\,dV + \mu\,dN + p\,dV + V\,dp \Longrightarrow \boxed{dH = T\,dS + \mu\,dN + V\,dp}$ … (4)
Helmholtz'sche Freie Energie F	Situation: Geschlossenes Gefäß im Wärmebad $\boxed{dT = 0, dV = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{dF = dE - T\,dS = d(E - TS) \leq 0}$ Natürliche Variablen: $F = F(T, V, N)$, weil $\boxed{F = E - TS} \Longrightarrow dF = dE - T\,dS - S\,dT \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $dF = T\,dS - p\,dV + \mu\,dN - T\,dS - S\,dT \Longrightarrow \boxed{dF = -p\,dV + \mu\,dN - S\,dT}$ … (5)
Freie Enthalpie G (Gibbb'sche Energie)	Situation: Gefäß ohne Teilchentausch mit konstantem Druck im Wärmebad $\boxed{dT = 0, dp = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow}$ $\boxed{dG = dE + p\,dV - T\,dS = d(E + pV - TS) \leq 0}$ Natürliche Variablen: $\boxed{G = G(T, p, N)}$, weil $\boxed{G = H - TS = E + pV - TS} \Longrightarrow$ $dG = dE + p\,dV + V\,dp - T\,dS - S\,dT \overset{(3)}{\Longrightarrow} dG = T\,dS - p\,dV + \mu\,dN + p\,dV + V\,dp - T\,dS - S\,dT \Longrightarrow$ $\boxed{dG = V\,dp - S\,dT + \mu\,dN}$ … (6)

Thermodynamische Potentiale (mit Magnetismus)

Allgemein	1.HS: $dU = \delta Q + \delta W \Longrightarrow \delta Q = dU - \delta W \mid \delta W = -p\,dV + \mu\,dN + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \Longrightarrow$ $\delta Q = dE + p\,dV - \mu\,dN - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}}$ … (1) 2.HS: $dS \geq \frac{\delta Q}{T} \Longrightarrow T\,dS \geq \delta Q \overset{(1)}{\Longrightarrow} T\,dS \geq dU + p\,dV - \mu\,dN - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \Longrightarrow$ $0 \geq dU + p\,dV - T\,dS - \mu\,dN - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \Longrightarrow \boxed{dU + p\,dV - T\,dS - \mu\,dN - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \leq 0}$ … (2)
Innere Energie U	$\boxed{dS = 0, d\vec{\mathcal{M}} = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{dU \leq 0}$ (mit zusätzlicher Annahme: $dV = 0$) Natürliche Variablen: $\boxed{U = U(S, \vec{\mathcal{M}}, N)}$, weil $dU = \delta Q + \delta W \Longrightarrow$ $\boxed{dU = T\,dS + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} + \mu\,dN = d(TS + \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}} + \mu N)}$ … (3) $\Longrightarrow \boxed{U = TS + \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}} + \mu N}$
Enthalpie H_m	$\boxed{dS = 0, d\vec{B}_{ext} = 0, dN = 0,} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{dH_m = dU - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} = d(U - \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}}) \leq 0}$ (mit zusätzl. Annahme: $dV = 0$) Natürliche Variablen: $\boxed{H_m = H_m(S, \vec{B}_{ext}, N)}$ weil $\boxed{H_m = U - \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}}} \Longrightarrow$ $dH_m = dU - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \overset{(3)}{\Longrightarrow} dH_m = T\,dS + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} + \mu\,dN - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} \Longrightarrow$ $\boxed{dH_m = T\,dS - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} + \mu\,dN}$ … (4)
Helmholtz'sche Freie Energie F_m	$\boxed{dT = 0, d\vec{\mathcal{M}} = 0, dN = 0,} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{dF_m = dU - T\,dS = d(U - TS) \leq 0}$ (mit zusätzlicher Annahme: $dV = 0$) Natürliche Variablen: $F_m = F_m(T, \vec{\mathcal{M}}, N)$ weil $\boxed{F_m = U - TS} \Longrightarrow dF_m = dU - T\,dS - S\,dT \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $dF_m = T\,dS + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} + \mu\,dN - T\,dS - S\,dT \Longrightarrow \boxed{dF_m = \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} - S\,dT + \mu\,dN}$ … (5)
Freie Enthalpie G_m (Gibbb'sche Energie)	$\boxed{dT = 0, d\vec{B}_{ext} = 0, dN = 0} \overset{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{dG_m = dU - T\,dS - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} = d(U - TS - \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}}) \leq 0}$ (mit zusätzl. $dV = 0$) Natürliche Variablen: $\boxed{G_m = G(T, \vec{B}_{ext}, N)}$, weil $\boxed{G_m = H_m - TS = U - \vec{B}_{ext} \cdot \vec{\mathcal{M}} - TS} \Longrightarrow$ $dG_m = dU - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} - T\,dS - S\,dT \overset{(3)}{\Longrightarrow}$ $dG_m = T\,dS + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} + \mu\,dN - \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} - T\,dS - S\,dT$ $\boxed{dG_m = -S\,dT - \vec{\mathcal{M}} \cdot d\vec{B}_{ext} + \mu\,dN}$

Phasenübergänge

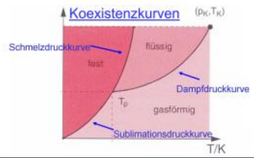
Definition Phase	Je nach äußeren Bedingungen nehmen bestimmte makroskopische Observablen unterschiedliche Merkmale an
gasförmig/flüssig	Beim Phasenübergang gasförmig/flüssig haben die $\mathrm{G}(p)_T$ und $\mathrm{G}(T)_p$ -Kurven einen Knick (sind aber stetig) Die ersten Ableitungen $\mathrm{V}(p)_T = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$ und $\mathrm{S}(T)_p = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p$ -Kurven haben einen Sprung (sind unstetig)
ÜG 1. Ordnung	Mindestens eine Ableitung von G (Ordnungsparameter) – also z.B. $\mathrm{V}(p)_T$ oder $\mathrm{S}(T)_p$ – weist eine Unstetigkeit auf.
ÜG 2. Ordnung	Die ersten Ableitungen von G (Ordnungsparameter) sind stetig, aber mindestens eine zweite Ableitung ist unstetig oder singulär (z.B. Wärmekapazität $c_p = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p$ oder Kompressibilität $\kappa_T = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial V^2}\right)_T$
Ordnungs-parameter (Landau)	ÜG 1. Ordnung: Der Ordnungsparam. ändert sich unstetig. Kontinuierlicher ÜG: Ordnungsparameter ändert sich stetig. Phase bei tiefen Temperaturen hat i.A. höhere Ordnung (Geringere Entropie). Ordnungswechsel i.A. mit Symmetriebrechnung verbunden. Phase höherer Ordnung (T klein) hat geringere Symmetrie z.B. Phase Flüssigkeit → Parameter Dichte. Phase Ferromagnet → Parameter: Magnetisierung, Rotationssymmetrie.
Thermodyn. Pot. magn. Stoffe	Innere Energie ist eine Funktion aller extensiver Variablen: $dU = TdS - p\,dV + \int \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{M} d^3r + \mu\,dN$ Für homogene magn. Flussdichten und ohne Volumsänderung: $dU = TdS - p\,dV + \vec{B}_{ext} \cdot d\vec{\mathcal{M}} + \mu\,dN \Longrightarrow$
Langevin Para-magnetismus	$\hat{H} = -\sum_{n=1}^{N} \hat{\mu}_n^z B_{ext}$ $\hat{\mu}_n^z = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\hat{L}_z + g_s \hat{S}_z)$ | Gibbs'sche Energie | $\mathrm{G}_m(T, B_{ext}) = -k_B T \ln(Z) = -N k_B T \ln\left(2\cosh\left(\frac{\mu_B B_{ext}}{k_B T}\right)\right)$
Austausch-WW: Ferromagnet	$\hat{H}_{heis} = \frac{1}{\hbar} g_s \mu_B B_{ext} \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i - \frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ mit $J > 0$… ferromagnetisch, $J < 0$… antiferromagnetisch
Molekularfeld-näherung	$\hat{H}_{heis}^{MF} = \left(\frac{1}{\hbar}\mu_B B_{ext} + z\frac{J}{\hbar}m\right)\sum_{i=1}^{N} S_i^z - zN\frac{J}{2}m^2$ mit z… Zahl der NN

Landau-Theorie der Phasenübergänge

Gibbs'sche Energie	Gegeben sei $G = \mathrm{G}(T, P_\phi, N)$ mit z.B. $P_\phi = \vec{B}_{ext}$ oder $P_\phi = p$.
Ordnungs-parameter	Der Ordnungsparameter ϕ ist eine erste Ableitung von G und hängt selber von T und P_ϕ ab, z.B. $\phi = \frac{\partial G}{\partial P_\phi} \Longrightarrow P_\phi = \frac{\partial G}{\partial \phi}$ Beispiel: $\phi = -\vec{\mathcal{M}} = \left(\frac{\partial G}{\partial \vec{B}_{ext}}\right)_{T,V}$
Entwicklung von G um kritischen Punkt	Entwicklung von G um den kleinen Ordnungsparameter ϕ in der Nähe des kritischen Punktes: $G = G_0 + G_1\phi + G_2\phi^2 + G_3\phi^3 + G_4\phi^4 + \cdots - (P_\phi - P_{\phi,c})$ Wenn $\mathrm{G}(\phi) = \mathrm{G}(-\phi)$ (inversionssysmmetrisch), dann keine ungeraden Potenzen: $G = G_0 + G_2\phi^2 + G_4\phi^4 + \cdots$
Kritischer Exponent β des Ordnungs-parameters und δ der ZSTGL der Isotherme	$\mathrm{G}(\phi) \to min \Longrightarrow G_4 > 0,$ da sonst für sehr kleine und sehr große ϕ die Werte von $\mathrm{G}(\phi)$ beliebig klein werden könnten. $\mathrm{G}(\phi) \to min \Longrightarrow \frac{\partial G}{\partial \phi} = P_\phi = 0$ (z.B. $\frac{\partial G}{\partial \phi} = \frac{\partial G}{\partial \vec{M}}$) $\Longrightarrow 2G_2\phi + 4G_4\phi^3 = 0 \|: (2\phi) \Longrightarrow 2G_4\phi^2 = -G_2 \Longrightarrow \phi^2 = -\frac{G_2}{2G_4} \Longrightarrow$ $\phi = \pm\sqrt{-\frac{G_2}{2G_4}} \Big\| G_2 \stackrel{\text{def}}{=} G_{2,1}(T - T_c) \Longrightarrow \phi = \pm\sqrt{-\frac{G_{2,1}(T-T_c)}{2G_4}} \Longrightarrow \boxed{\phi = \pm\sqrt{\frac{G_{2,1}(T_c-T)}{2G_4}} \text{ für } T < T_c \text{ sonst } 0}$ … (1) $\Longrightarrow$ $\phi \sim \|T - T_c\|^{1/2} \Longrightarrow \boxed{\beta = \frac{1}{2}}$ (Kritischer Exponent des Ordnungsparameters) $P_\phi = \frac{\partial G}{\partial \phi} = 2G_2\phi + 4G_4\phi^3 = 2G_{2,1}(T - T_c) + 4G_4\phi^3 \Longrightarrow \lim_{T \to T_c} P_\phi \sim \phi^3 \Longrightarrow \boxed{\delta = 3}$
Kritischer Exponent γ der Response-Funktion (Curie-Weiss-Gesetz)	$\mathrm{G}(\phi) \to min \Longrightarrow \frac{\partial^2 G}{\partial \phi^2}\Big\|_T = \frac{\partial P_\phi}{\partial \phi}\Big\|_T > 0 \Longrightarrow 2G_2 + 12G_4\phi^2 > 0 \| G_2 \stackrel{\text{def}}{=} G_{2,1}(T - T_c) \Longrightarrow 2G_{2,1}(T - T_c) + 12G_4\phi^2 > 0$ … (2) (i) sei $T > T_c \stackrel{(1)}{\Longrightarrow} \phi^2 = 0 \stackrel{(2)}{\Longrightarrow} \boxed{\frac{\partial P_\phi}{\partial \phi}\Big\|_T = \frac{1}{\chi} = 2G_{2,1}(T - T_c) \text{ für } T > T_c}$ (ii) sei $T < T_c \stackrel{(1)}{\Longrightarrow} \phi^2 = \frac{G_{2,1}(T_c-T)}{2G_4} \stackrel{(2)}{\Longrightarrow}$ $2G_{2,1}(T - T_c) + 12G_4\frac{G_{2,1}(T_c-T)}{2G_4} \Longrightarrow - \boxed{\frac{\partial P_\phi}{\partial \phi}\Big\|_T = \frac{1}{\chi} = 4G_{2,1}(T_c - T) > 0 \text{ für } T < T_c}$ $\chi = \frac{\partial \phi}{\partial P_\phi} = \begin{cases} \frac{1}{2G_{2,1}(T-T_c)} & \text{für } T > T_c \\ \frac{1}{4G_{2,1}(T-T_c)} & \text{für } T < T_c \end{cases} \Longrightarrow \chi \sim \|T - T_c\|^{-1} \Longrightarrow \boxed{\gamma = 1}$

Statistische Physik I

Flüssigkeiten und Gase

Ideales Gas, therm. Zustglchg	$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{Nk_BT}{V} \Longrightarrow pV = Nk_BT = nRT$	$R = N_Ak_B;\ N = nN_a$	 1)
Betrachtung auf Teilchenebene			
Mittlere kinetische Energie: $\bar{E}_{kin} = \frac{f}{2}k_BT = \frac{m}{2}\overline{v^2}$	Mittleres Geschw. quadrat	$\overline{v^2} = \int_0^\infty v^2\, f(v)\, dv = \frac{3k_BT}{m}$	
Kalorische Zustandsgl.	$E_{kin} = \frac{1}{2}k_bT$ (pro FG); $\bar{E} = F + TS = T - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{f}{2}Nk_BT$ (N Teilchen)		Gibbs'sche Phasenregel: $F = 2 + K - P$

Reale Gase (Van-der-Waals-Gleichung)	Ehrenfest:	Sprung in n-ter Abl. des Ordnungsparameters (z.B Dichte): Phasenüberg. n-ter Ordnung							
$\left(p + \frac{N^2a}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_BT$	$a \ldots Stoffkonstante$ $b = 4N_AV_a = 4N_A\frac{4\pi}{3}r_a^3$	Krit. Temp.:	$T_k = \frac{8a}{27Rb}$	Krit. Druck	$p_k = \frac{a}{27b^2}$	Krit. Vol.	$V_k = 3b$	$\frac{p_kV_k}{RT_k} = \frac{3}{8}$	Oberh. der kritischen Temp. kann Gas nicht verflüs werden
Kalorische Zustandsgleichung:	$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{f}{2}RT - \frac{a}{V}$	Molare Schmelzw.	$\Lambda_{schm} = T\frac{dp}{dT}(V_{fl} - V_{fest})$	Boyle Temp.	$T_b = \frac{a}{bR}$	Bei T_b verh. sich Gas annähernd ideal			

Thermodynamik

1) Abb. aus: Wolfgang Demtröder (2105): Experimentalphysik 1. Mechanik und Wärme. 7. Auflage. Springer, 2015S. 215.

0. Haupts.	• Wenn A und B im therm. Gleichgewicht und B und C im Gleichgewicht, dann ist auch A mit C im thermischen Gleichgewicht.
1. Hauptsatz	Jedes System besitzt eine innere Energie E (extensive Zustandsgröße). Diese kann sich nur über den Transport von mechanischer Arbeit W und Wärme Q über die Systemgrenzen ändern: $dE = \delta Q + \delta W$ • Die innere Energie E eines isolierten Systems ist erhalten • Die innere Energie eines Systems ändert sich genau in dem Maß, in dem Energie zugeführt oder entzogen wird.
2. Hauptsatz	• Einem makroskopischen System im Gleichgewicht kann eine Entropie S zugeordnet werden, für die gilt: ○ S ist eine extensive Zustandsfunktion. ○ Bei reversibler Transformation ($\oint dS = 0$) gilt: $dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$ (mit $1/T$ als integrierenden Faktor) • Die Entropie eines isolierten Systems kann nie abnehmen. Jeder Prozess läuft, bis die Entropie maximal wird. $dS \geq \frac{\delta Q}{T}$ • Es gibt keine Zustandsänderung, deren einziges Ergebnis die Übertragung von Wärme von einem Körper niederer auf einen Körper höherer Temperatur ist. • Es gibt keine Wärmekraftmaschine, die bei gegebenen mittleren Temperaturen der Wärmezufuhr und Wärmeabfuhr einen höheren Wirkungsgrad hat als den aus diesen Temperaturen gebildeten Carnot-Wirkungsgrad.
3. Haupts.	• Nernst: Es ist nicht möglich, ein System bis zum absoluten Nullpunkt abzukühlen.

Fundamentalgleichung 1.HS	$dE = \delta Q + \delta W$ $dE = TdS - p\,dV + \mu\,dN$	δ: unvollst. Diff.	dE ... Zunahme innere Energie δQ ... zugeführte Wärme δW ... zugeführte Arbeit	E... Zustandsgröße Q... keine Zustandsgröße W... keine Zustandsgröße	Zugeführte Wärme ⇒ Erhöhung Enthalpie H=U+pV
Isochor V=const.	$\delta W = 0 \Rightarrow dE = \delta Q$ $(dE)_V = \delta Q = nc_v\,dT$	$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{f}{2}N_Ak_B = \frac{f}{2}R \ldots spez.\ Molwärme\|_V$		$\frac{p_2}{p_1} = \frac{T_2}{T_1}$	Zugeführte Wärme ⇒ Erhöhung von U≙Q∝T
isobar p=const.	$(dH)_p = \delta Q = dE - \delta W =$ $nc_v\,dT + p\,dV = nc_v\,dT + nR\,dT$	$c_p = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_p = c_v + R = \frac{f}{2}R + R$		$\frac{V_2}{V_1} = \frac{T_2}{T_1}$	$\Delta W = \int_{V_1}^{V_2} p\,dV = p(V_2 - V_1) = nR(T_2 - T_1)$ Zugeführte Wärme ⇒ Erhöhung der Enthalpie H=E+pV
isotherm T=const.	$dE = 0$ (bei i.G. dU∝dT) $\delta Q = -\delta W$	$\Delta W = Nk_BT\ln\frac{V_1}{V_2} = Nk_BT\ln\frac{p_2}{p_1}$		$p_1V_1 = p_2V_2$	Zugeführte Wärme ⇒ Arbeit
adiabat. δQ=0	$\delta Q = 0$ $dE = \delta W$ $S = const.$ (wenn reversibel)	$TV^{\kappa-1} = const.$ $pV^\kappa = const.$	$\kappa = \frac{c_p}{c_v} = \frac{f+2}{f}$	$\Delta W_{ad} = \frac{Nk_B}{\kappa - 1}(T_2 - T_1)$	$\frac{T_1}{T_0} = \left(\frac{V_0}{V_1}\right)^{\kappa-1} = \left(\frac{p_1}{p_0}\right)^{1-\frac{1}{\kappa}}$
polytrop	$pV^n = const.;\ n = 0 \ldots isobar;\ n = 1 \ldots isotherm;\ n \to \infty \ldots\ isochor;\ n = \kappa \ldots\ adiabat$				$\Delta Q = mc_v\frac{n-\kappa}{n-1}(T_2 - T_1)$
2. HS	$\eta = \frac{\|\Delta W\|}{Q_{zugef}} = 1 - \frac{T_k}{T_w} < 1$	$Energie = Exergie + Anergie$ $\Delta Q_w = -\Delta W - \Delta Q_k$		Carnot-Prop.: $\frac{\Delta Q_w}{T_w} + \frac{\Delta Q_k}{T_k} = 0$	Clausius: $\oint\frac{\delta Q}{T} = 0$
3. HS Entropie	Entropie: Extensives Maß für Energie, die nicht für Arbeit verfügbar ist; für die Unordnung und die Multiplizität eines Systems. $dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T};\ \oint dS = 0$	$\Delta S = k_B\ln\frac{W_e}{W_a} \geq 0;\ S = k_B\ln\Omega \approx k_B\ln\phi$		Sackur-Tetrode	$S = Nk_B\left(\ln\left(\frac{1}{n\lambda_T^3}\right) + \frac{5}{2}\right); n = \frac{N}{V};\ \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_BT}}$

Fundamentalgl. („FG")	**Enthalpie H**	**Helmholtz'sche freie Energie F**	**Freie Enthalpie G („Gibbs'sche freie Energie")**
$E \equiv TS - pV + \mu N$ $dE = \delta Q + \delta W$ $dE = TdS - p\,dV + \mu\,dN$	$H \equiv E + pV \xRightarrow{abl.,FG\ einsetz.}$ $dH = T\,dS + V\,dp$ dp=0: H=Energie, um E um dE zu erhöhen, wenn ein Teil der Energie für p dV verw. wird.	$F \equiv E - TS \xRightarrow{abl.,FG\ einsetz.}$ $dF = -S\,dT - p\,dV$ $F = -k_BT\ln(Z_k)$ Thermod. Potential: $dF \leq 0$	$G \equiv H - TS$ $G \equiv E + pV - TS \xRightarrow{abl.,FG\ einsetz.}$ $dG = -S\,dT + V\,dp$ Thermod. Potential: $dG \leq 0$

Extensive Variable:	verhalten sich additiv mit der Größe des Systems, z.B. V, S, N, M und alle thermodynam. Potentiale E, S, H, F, G	Intensive Variable:	sind größenunabhängig z.B. p, T, μ, b	Konjugierte Variable:	$V \leftrightarrow p;\ S \leftrightarrow T;$ $N \leftrightarrow \mu;\ M \leftrightarrow B$

Gleichgewichtsbedingung: GLG bei Gleichheit der intensiven Variablen: mechanisch: $p_1 = p_2$, thermisch: $T_1 = T_2$, chemisch: $\mu_1 = \mu_2$.

- Isoliertes System: Natürliche Variablen E, V, N. Potential: $E(S, V, N)$ oder $S(E, V, N)$
- Geschlossenes System mit Energietausch, ohne Volumenvariation und Teilchentausch: Natürliche Variablen T, V, N. Potential: $F(T, V, N)$
- Geschlossenes System mit Volumenvariation, ohne Teilchentausch: Natürliche Variablen S, p, N. Potential: $H(S, p, N)$
- Geschlossenes System mit Energietausch und Volumenvariation, ohne Teilchentausch: Natürliche Variablen T, p, N. Potential: $G(T, p, N)$
- Offenes System mit Austausch von Energie und Teilchen. Natürliche Variablen T, V, μ. Potential: großkanonisches Potential $J(T, V, \mu)$

Reversibel:	Prozess kann ohne Änderung von System oder Umgebung umgekehrt werden. Reversibel ⟹ quasi-statisch.
Gibbs-Duhem:	$-S\,dT + V\,dp - N\,d\mu = 0$ … Es gibt kein Potential mit ausschließlich intensiven Variablen (keine Info über Systemgröße)

Maxwell-Diagramm

S E V H F p G T	Echt viele Fysiker trinken gerne Pils hinterm Schreibtisch	Annahme: N=const. Ecken: nat. Variable Seitenmitt.: Potentiale z.B.: $G = \mathrm{G}(T,p,N)$	Bsp. Mitte-Ecke-Ecke:	$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p$ $\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} = T$	Bsp. Ecke-Ecke senkr.	$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N}$	Bsp. Ecke-Ecke waagr: $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}$

Response-Funktionen: Zweite Ableitungen thermodynamischer Potentiale bzgl. natürlicher Variablen

spez. Wärme isochor	$C_V \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N} \Big\vert\, dE = TdS \Longrightarrow C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N} \Big\vert\, S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} \Longrightarrow C_V = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{V,N}$		
spez. Wärme isobar	$C_p \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p,N} \Big\vert\, dH = TdS \Longrightarrow C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,N} \Big\vert\, S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,N} \Longrightarrow C_p = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{p,N}$		
Thermodynam. Stabilität isoth.	$\kappa_T \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N} \Big\vert\, V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} \Longrightarrow \kappa_p = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_{T,N}$	Thermodynam. Stabilität adiab.	$\kappa_S \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{S,N} \Big\vert\, V = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_S \Longrightarrow \kappa_S = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\right)_S$
Ausdehnungs-koeff. isoboar	$\alpha_p \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N} \Big\vert\, V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} \Longrightarrow \alpha_p = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p}\right)_N$	Spannungskoeff-izient isochor	$\beta_V \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{p}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N} \Big\vert\, p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \Longrightarrow \beta_V = -\frac{1}{p}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}\right)_N$

Phasenraum mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Γ-Raum für $\mathbb{R}^n$:	$\mathrm{Dim}(\Gamma) = 2DN$	Eingeschl. Vol.	$\phi(E) = \frac{1}{h^{DN}N!}\int_{H\le E} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$	In Box:	$\phi(E) = \frac{1}{h^{DN}N!}\mathrm{V}_n{}^N \int_{H\le E} d^{DN}\underline{p}$	N! nur wenn nicht unterscheidbar
Hamilton	$H = T + V$	Teilchen in Box 1D	$\mathrm{H}(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \mathrm{V}(q)$ mit $\mathrm{V}(q) = \begin{cases} 0 & \vert q\vert \le \frac{L}{2} \\ \infty & \vert q\vert > \frac{L}{2} \end{cases}$	Harm. Osz. 1D	$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$	μ-Raum $\mathbb{R}^n$: $\mathrm{Dim}(\mu) = 2D$
Liouvill'sches Theorem	$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$ … keine „Quellen" u. „Senken" von Phasenraumpunkten; keine Schnittpunkte von Trajektorien. $\Longrightarrow$ $V_0 = V_t$ … Erhaltung des Phasenraumvolumens					
Ergodisch	Energie ist einzige Invariante.					
Ergoden-hypothese	Mikrokanonisches Ensemble, ergodisch: Alle Mikrozustände gleicher Energie sind gleich wahrscheinlich. $\Longrightarrow \bar{A} = \langle A\rangle$ Zeitmittelwert einer Observable: $\bar{A} = \frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{A}(\mathrm{q}(t), \mathrm{p}(t))\, dt$; Ensemblemittelwert: $\langle A\rangle = \int_{H\le E} \mathrm{A}\left(\underline{q}, \underline{p}\right) \rho\left(\underline{q}, \underline{p}\right) d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$					

Klassisches mikrokanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

E, V, N fix (isoliert)	Zust.sum:	$\Omega = \lim_{\Delta E\to 0}\frac{1}{h^{DN}N!}\int_{E-\Delta E\le H\le E} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \int \delta(E-H)\, d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \frac{\partial}{\partial E}\int \Theta(E-H)\, d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \frac{\partial}{\partial E}\phi(E)$			
Phasenraumdichte: (Wahrsch. d. Besetzung von Zust. gleicher Energie)	$\rho_{MK}^E\left(\underline{p}, \underline{q}\right) = \frac{\delta(E-H)}{\Omega}$	Entropie:	$S = k_B \ln(\Omega) \approx k_B \ln(\Phi)$	Erw. wert:	$\langle A\rangle_{MK} = \frac{1}{h^{DN}N!}\int A\rho_{MK}^E d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$

Klassisches kanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

T, V, N fix (Wärmebad)	Zust.sum:	$Z_K = \int_0^\infty e^{-\beta E}\,\Omega(E)\, dE = \frac{1}{h^{DN}N!}\int e^{-\beta H} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$ *) mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$	Ideales Gas:	$Z_K = \frac{V^N}{N!\lambda_T^{3N}}$ mit $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$			
Phasenraumdichte (Wahrsch. d Besetzung von Zust. gleicher Temp.):	$\rho_K\left(\underline{p}, \underline{q}\right) = \frac{1}{Z_K}e^{-\beta H}$	Freie Energ	$F = -k_B T\ln(Z_K)$	Entropie:	$S = -k_B\langle\ln(\rho_K)\rangle = -\frac{\partial F}{\partial T}$	Druck	$p = k_B T\frac{\partial \ln(Z_K)}{\partial V}$
Wahrscheinlichkeit $\mathrm{w}(E)\, dE$	**Var 1:** $\mathrm{w}(E) = \frac{1}{Z_K}\Omega(E)\, e^{-\beta E} = \frac{1}{Z_K}\frac{\partial \Phi}{\partial E}e^{-\beta E}$ **Var 2:** $\mathrm{w}(E) = \frac{1}{h^{DN}N!}\int \rho_K\left(\underline{p}, \underline{q}\right)\delta\left(\mathrm{H}\left(\underline{p}, \underline{q}\right) - E\right) d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \frac{1}{Z_K h^{DN}N!}\int e^{-\beta H}\,\delta\left(\mathrm{H}\left(\underline{p}, \underline{q}\right) - E\right) d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} \Big\vert\, a^2 = 2m;\ b^2 = \frac{2}{m\omega^2}$ $\mathrm{w}(E) = \frac{1}{Z_K h^{DN}N!}\int e^{-\beta\sum(p_i^2/a^2 + q_i^2/b^2)}\,\delta\left(\sum\left(\frac{p_i^2}{a^2} + \frac{q_i^2}{b^2}\right) - E\right) d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} \Big\vert\, p_i = as_i;\ dp_i = ads_i;\ q_i = bt_i;\ dq_i = bdt_i$ $\mathrm{w}(E) = \frac{a^{DN}b^{DN}}{Z_K h^{DN}N!}\int e^{-\beta\sum(s_i^2 + t_i^2)}\,\delta(\sum(s_i^2 + t_i^2) - E)\, d^{DN}\underline{s}\, d^{DN}\underline{t} \Big\vert\, \sum(s_i^2 + t_i^2) = r^2;\ d^{DN}\underline{s}\, d^{DN}\underline{t} = dr\, d^{DN}OF$ $\mathrm{w}(E) = \frac{a^{DN}b^{DN}}{Z_K h^{DN}N!}\int\int_0^\infty e^{-\beta r^2}\,\delta(r^2 - E)\, dr\, d^{DN}OF \Big\vert\, NST = \mathrm{root}(r^2 - E) = \sqrt{E};\ \delta(r^2 - E) = \frac{\delta(r - NST)}{\frac{\partial}{\partial r}(r^2 - E)\big\vert_{r=NST}} = \frac{\delta(r - \sqrt{E})}{2\sqrt{E}}$ $\mathrm{w}(E) = \frac{a^{DN}b^{DN}}{2\sqrt{E}Z_K h^{DN}N!}\int\int_0^\infty e^{-\beta r^2}\,\delta\left(r - \sqrt{E}\right) dr\, d^{DN}OF \Big\vert\, \int d^{DN}OF = \frac{\partial V_{2DN}}{\partial r} = \frac{\pi^{2DN/2}}{\Gamma(2DN/2+1)}2DN\cdot r^{2DN-1}$ $\mathrm{w}(E) = \frac{a^{DN}b^{DN}}{2\sqrt{E}Z_K h^{DN}N!}\frac{\pi^{2DN/2}}{\Gamma(2DN/2+1)}2DN\int_0^\infty e^{-\beta r^2}r^{2DN-1}\,\delta\left(r - \sqrt{E}\right) dr$ $\mathrm{w}(E) = \frac{a^{DN}b^{DN}}{2\sqrt{E}Z_K h^{DN}N!}\frac{\pi^{2DN/2}}{\Gamma(2DN/2+1)}2DNe^{-\beta E}E^{(2DN-1)/2}$						
Mittlere Energie	$\langle E\rangle = \frac{1}{h^{DN}N!}\int \mathrm{H}\left(\underline{p}, \underline{q}\right)\rho_K d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \int_0^\infty E\,\mathrm{w}(E)\, dE = -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln(Z_K)$	Varianz	$\delta E^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\ln(Z_K)$				
Wahrsch. räuml. Aufteilg. 1 Teilch:	$\mathrm{w}(\vec{r})\, d^3x = Ae^{-\beta\mathrm{V}(\vec{r})}d^3x$ mit A: $\iiint_{-\infty}^\infty \mathrm{w}(\vec{r})\, d^3x = 1$	oder: $\mathrm{w}(\vec{r}) = \frac{1}{h^{DN}N!}\int \rho_K d^{DN}\underline{q}\, d^{DN-3}\underline{p}$					
Wahrsch. Auslenkung 1 Teilchen:	$\mathrm{w}(r)\, dr = (\iint \mathrm{w}(x^2 + y^2 + z^2)\, r^2\sin(\vartheta)\, d\varphi\, d\vartheta)dr$						
Wahrsch. Impuls 1 Teilchen:	$\mathrm{w}(\vec{p})\, d^3p = Ae^{-\beta\mathrm{T}(\vec{r})}d^3p$ mit A: $\iiint_{-\infty}^\infty \mathrm{w}(\vec{p})\, d^3p = 1$	oder: $\mathrm{w}(\vec{p}) = \frac{1}{h^{DN}N!}\int \rho_K d^{DN-3}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$					
Wahrsch. Geschwindigk. 1 Teilchen	$\frac{\partial p_i}{\partial v_i} = \frac{\partial(mv_i)}{\partial v_i} = m \Longrightarrow dp_i = m\, dv_i \Longrightarrow d^3p = m^3d^3v \Longrightarrow \mathrm{w}(\vec{v})\, d^3x = \mathrm{w}\left(mv_x, mv_y, mv_z\right)m^3d^3v$						
Viralsatz:	$\langle x_i\frac{\partial H}{\partial x_j}\rangle = k_B T\delta_{ij}$	Komb. System:	$z_k^{(1+2)} = z_k^{(1)}z_k^{(2)}$	*) Faktor N! nur wenn Teilchen nicht unterscheidbar			

Klassisches großkanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

T, V, μ fix; off. System	Zust.sum:	$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{h^{DN} N!} \int e^{-\beta(H-\mu N)} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_K = e^{z\, Z_K(N=1)}$ mit $z = e^{\beta\mu}$ („Fugazität")			
Phasenraumdicht	$\rho_K\left(\underline{p},\underline{q}\right) = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(H-\mu N)}$	Großkanon. Potential:	$J = F - \mu N = -pV = -k_B T \ln(Z_{GK})$	w d. N Teilch in V	$w(N) = \frac{z^N Z_K}{Z_{GK}}$
Mittl. Teilchen:	$\langle N\rangle = \frac{1}{Z_{GK}} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{h^{DN} N!} \int N e^{-\beta(H-\mu N)} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = -\frac{\partial J}{\partial\mu} = k_B T \frac{\partial}{\partial\mu}\ln(Z_{GK}) = z\, Z_K(N=1)$			Ideales Gas:	$Z_{GK} = e^{zV/\lambda_T}$
Mittl. Energ:	$\langle E\rangle = k_B T\left(T\frac{\partial}{\partial T}\ln(Z_{GK}) + \mu\frac{\partial}{\partial\mu}\ln(Z_{GK})\right) = \frac{\partial(\beta J)}{\partial\beta} + \mu\langle N\rangle$	Entrop.	$S = -k_B\langle\ln(\rho_{GK})\rangle = -\frac{\partial J}{\partial T} = k_B T\frac{\partial}{\partial T}\ln(Z_{GK}) + k_B\ln(Z_{GK})$		

Quantenstatistik

Korrespondenzen	statt $(q_i, p_i) \Longrightarrow \lvert\Psi_i\rangle$; statt $\rho\left(\underline{q},\underline{p}\right) \Longrightarrow$ Dichtematrixoperator $\hat{\rho}$; Observable: statt $\langle A\rangle = \int_\Gamma A\rho\, d^3p\, d^3q \Longrightarrow \langle A\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right)$					
Entropie:	$S = -k_B\,\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln(\hat{\rho}))$	Energie:	$\langle E\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{H}\hat{\rho}\right)$	Reiner Zustand:	$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}; \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$	$\sum_i f(\varepsilon_i) \approx \int_0^\infty \Omega_1\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon$

Mikrokanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Mikrokanonische Zustandssumme:	$\Omega = \sum m\ddot{o}gl.Zust.$	Zustandsdichte	$\hat{\rho}_{MK} = \frac{1}{\Omega}\sum_{E_i=E}\lvert i\rangle\langle i$	Entropie:	$S = -k_B\,\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln(\hat{\rho})) = k_B\ln(\Omega)$
Bsp.: N Teilchen in fixen Positionen mit 2 Einstellungen; sei i die Anz. der „up"-Teilchen („magn. Dipole")	Zust-sum:	$\Omega(E_i) = \binom{N}{i} = \frac{N!}{i!(N-i)!}$	Wahrsch. f. Zustand i:	$w(E_i) = \frac{\Omega(E_i)}{2^N}$	

Kanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Kanon Zust.sum	$Z_K = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right)$	Hamilton:	$\hat{H} = \sum_n \lvert n\rangle E_n\langle n\rvert$	Zust. Dichte:	$\hat{\rho}_K = \frac{\sum_n \lvert n\rangle e^{-\beta E_n}\langle n\rvert}{\sum_n e^{-\beta E_n}}$
Bsp: N Teilchen in fixen Positionen mit 2 Einstellungen; sei i die Anz. der „up"-Teilchen („magnetische Dipole")	Zust. summe:	$Z_K = \sum_{j=0}^{N}\Omega(j)\, e^{-\beta E_j}$	Wahrsch. für Zustand E_i:	$w(E_i) = \frac{1}{Z_K}\Omega(E_i)\, e^{-\beta E_i}$	
Harmon. Osz; 2 Teilchen	$Z_K^{Fermi} = \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=n_1+1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_1+n_2+1)} = \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2-n_1=1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(2n_1+n_2-n_1+1)} = e^{-\beta\hbar\omega}\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-2\beta\hbar\omega n_1}\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega k}$ $Z_K^{Bose} = \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=n_1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_1+n_2+1)} = \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2-n_1=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(2n_1+n_2-n_1+1)} = e^{-\beta\hbar\omega}\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-2\beta\hbar\omega n_1}\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega k}$				

Großkanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Großkan. Zust.summe		$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\beta(\hat{H}-\mu N)} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H}_{Fock}-\mu\hat{N}_{Fock})}\right)$	Zust. Dichte:	$\hat{\rho}_{GK} = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$	Hamilton:	$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{N}_i$
Bose-Gas	Besetzung	$\langle n_i\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}-1}$	$\langle N\rangle = -\frac{\partial J}{\partial\mu} = \sum_i\langle n_i\rangle = \sum_i\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}-1} = \int_0^\infty (2s+1)\Omega_1\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon = \int_0^\infty\langle N(\varepsilon)\rangle\, d\varepsilon$			
	Großkan. Pot.:	$J = k_B T\sum_i\ln\left(1 - ze^{-\beta\varepsilon_i}\right) = \int_0^\infty (2s+1)\Omega_1\ln\left(1 - ze^{-\beta\varepsilon}\right)d\varepsilon = -k_B T(2s+1)\int_0^\infty \Phi_1\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\ln\left(1 - ze^{-\beta\varepsilon}\right)d\varepsilon$				
	Energie	$\langle E\rangle = \sum_i\varepsilon_i\langle n_i\rangle = \sum_i\frac{\varepsilon_i}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}-1} = \int_0^\infty$ $(2s+1)$ $30\Omega_1\frac{\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon$				
Fermi gas	Besetzung	$\langle n_i\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}+1} = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}+1}$	$\langle N\rangle = -\frac{\partial J}{\partial\mu} = \sum_i\langle n_i\rangle = \sum_i\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}+1} = \int_0^\infty (2s+1)\Omega_1\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon = \int_0^\infty\langle N(\varepsilon)\rangle\, d\varepsilon$			
	Großkan. Pot.:	$J = -k_B T\sum_i\ln\left(1 + ze^{-\beta\varepsilon_i}\right) = -\int_0^\infty (2s+1)\Omega_1\ln\left(1 + ze^{-\beta\varepsilon}\right)d\varepsilon = k_B T(2s+1)\int_0^\infty \Phi_1\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\ln\left(1 + ze^{-\beta\varepsilon}\right)d\varepsilon$				
	Energie	$\langle E\rangle = \sum_i\varepsilon_i\langle n_i\rangle = \sum_i\frac{\varepsilon_i}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}+1} = \int_0^\infty (2s+1)\Omega_1\frac{\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon$				
Einstein-Bose-Kond.:		$z = e^{\beta\mu}$. Normal: μ<0; z<1. $\mu = k_B T\ln(z) = k_B T\ln\left(\frac{\langle N\rangle}{V}\lambda_T^3\right)$. EBK bei $T < T_C$ oder hohem Druck. EBK: $z \geq 1$; $\mu \geq 0$; $\frac{\langle N\rangle}{V}\lambda_T^3 \geq 1$; $\frac{\lambda_T}{\langle L\rangle} \geq 1$. (mit mittl. Weglänge $\langle L\rangle \approx \sqrt[3]{\frac{V}{\langle N\rangle}}$)				

Wichtige Integrale und Funktionen

Wichtige Integrale	$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$	$\int f(x)\, e^{-a\, f(x)}\, dx = -\frac{\partial}{\partial a}\int e^{-a\, f(x)}\, dx$	partiell Integrieren:	$\int f'g = fg - \int f g'$
Integral $\int_{H\leq E} d\underline{q}\, d\underline{p}$ (Bsp. Harmon. Oszillator)	$\int_{H\leq E} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \int_{\sum\left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{m\omega^2 q_i^2}{2}\right)\leq E} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = \int_{\sum\left(\frac{p_i^2}{2mE}+\frac{m\omega^2 q_i^2}{2E}\right)\leq 1} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$ $\Big\vert$ $a^2 = 2mE$, $b^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$ $=$ $\int_{\sum\left(\frac{p_i^2}{a^2}+\frac{q_i^2}{b^2}\right)\leq 1} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p}$ $\Big\vert$ $p_i = as_i; dp_i = a\,ds_i$; $q_i = bt_i;\ dq_i = b\,dt_i$ $= a^{DN} b^{DN}\int_{\sum(s_i^2+t_i^2)\leq 1} d^{DN}\underline{q}\, d^{DN}\underline{p} = a^{DN} b^{DN}\, V_{DN}(R=1)$			
Polylogarithmus	$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)}\int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1}dx = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{z^k}{k^s}$			

Stirling-Formel	$\lim_{N\to\infty}\ln(N!) = N\ln(N) - N$	D-dim. Kugel, Volumen:	$V_n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}R^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} \overset{\text{wenn } n \text{ gerade}}{=} \frac{\pi^{\frac{n}{2}}R^n}{\left(\frac{n}{2}\right)!}$	n-dim. Kugel Oberfläche:	$O_n = \frac{\partial V_n}{\partial R} = \frac{n\pi^{n/2}R^{n-1}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} \overset{\text{wenn } n \text{ gerade}}{=} \frac{n\pi^{n/2}R^{n-1}}{\left(\frac{n}{2}\right)!}$	
Gamma-Funktion: Erweiterung d. Fakultät auf $\mathbb{C}$	$\Gamma(\underline{z}) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}\, dt$; $\mathrm{Re}(\underline{z}) > 0$	$z! = \Gamma(z+1)$	$\Gamma(z+1) = z\,\Gamma(z)$	$\Gamma(z)\,\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}$	$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$	
Delta-Funktion	$\delta(x) \leftrightarrow \delta[\varphi] = \delta_0[\varphi] = \varphi(0) \leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,\varphi(x)\, dx = \varphi(0)$	$\delta(x - x_0)\,\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0)$				
	$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\, dx = 1$	$\int_a^b \delta(x)\, dx = \begin{cases} 1, f\ddot{u}r\ 0 \in [a,b] \\ 0, sonst \end{cases}$	$\delta(x) = \frac{d}{dx}H(x)$	$f(x)\,\delta(x - x_0) = f(x_0)\,\delta(x - x_0)$	$\delta(x) = \delta(-x)$	
	$x\,\delta(x) = 0$	$\delta(ax) = \frac{1}{\lvert a\rvert}\delta(x)$	$\lvert x\rvert\,\delta(x^2) = \delta(x)$	$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - NST_i)}{\lvert f'(NST_i)\rvert}$; NST_i ...einfache NST	$\int\delta(x)\, dx = \Theta(x)$	
Heaviside-Funktion	$\Theta(x) \leftrightarrow \Theta[\varphi] = \int_0^\infty \varphi(x)\, dx$; $\Theta(x - x_0) = \int_{-\infty}^{x-x_0}\delta(t)\, dt$; $\Theta(x) = \begin{cases} 1\ f\ddot{u}r\ x > 0 \\ \frac{1}{2}\ f\ddot{u}r\ x = 0 \\ 0\ sonst \end{cases}$			$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!\,(n-k)!}$		
Exp.funktion	$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$	Geometr. Reihe:	$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q}$; $(0 < \lvert q\rvert < 1)$			
$\cosh(z) = \frac{e^z+e^{-z}}{2}$; $\sinh(z) = \frac{e^z-e^{-z}}{2}$; $\tanh(z) = \frac{e^z-e^{-z}}{e^z+e^{-z}}$; $\coth(z) = \frac{e^z+e^{-z}}{e^z-e^{-z}}$						

Sonstiges

Vollständig Differential	$\mathrm{dF}(x,y) = \frac{\partial F}{\partial x}\Big\vert_y dx + \frac{\partial F}{\partial y}\Big\vert_x dy$	Sei $dF = \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$. Wenn $\int_{C1} \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = \int_{C2} \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$, dann ist $\vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$ vollst. Differential
	Hinreichende Bedingung: $\nabla \times \vec{f}(\vec{r}) = 0$ („wirbelfrei") im einfach zusammenhängenden Gebiet G. In $\mathbb{R}^2$: $\frac{\partial f_y}{\partial x} = \frac{\partial f_x}{\partial y}$	
Exakte, nicht separable DG erster Ordnung	$p(x,y) + q(x,y)y' = 0 \rightarrow$ $p(x,y)\,dx + q(x,y)\,dy = 0$ $wobei\ \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial q}{\partial x}$	$Prüfe: \frac{\partial p}{\partial y} \stackrel{?}{=} \frac{\partial q}{\partial x}$ →wenn nein: finde integrierenden Faktor $a(x,y) \rightarrow$ $\phi(x,y) = \int p(x,y)\,dx + \mathrm{C}(y) = \int q(x,y)\,dy + \mathrm{D}(x) \rightarrow$ $\rightarrow bestimme\ \mathrm{C}(y)\ und\ \mathrm{D}(x)$
Ermittlung integrierender Faktor	$\frac{\partial p}{\partial y} = \mathrm{p}'(x) \wedge \frac{\partial q}{\partial x} = \mathrm{q}'(x), oder$ $\frac{\partial p}{\partial y} = \mathrm{p}'(y) \wedge \frac{\partial q}{\partial x} = \mathrm{q}'(y)$	$z.B.\ x: Löse\ DG\ \frac{\partial}{\partial y}[p(x,y)a(x)] = \frac{\partial}{\partial x}[q(x,y)a(x)]\ nach\ a$ $mittels\ Separation\ der\ Variablen$
	$\frac{\partial p}{\partial y} = \mathrm{p}'(x,y) \vee \frac{\partial q}{\partial x} = \mathrm{q}'(x,y)$ $und\ p\ und\ q\ sind\ Polynome.$	$\frac{\partial}{\partial y}[p(x,y)x^\alpha y^\beta] = \frac{\partial}{\partial x}[q(x,y)x^\alpha y^\beta] \rightarrow$ $auflösen\ nach\ \alpha\ und\ \beta\ mit\ KV\ für\ alle\ x^n y^n$
Homogene Fkt.	$\mathrm{f}(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^k\,\mathrm{f}(x,y,z) \Longrightarrow k\,\mathrm{f}(x,y,z) = \frac{df}{dx}x + \frac{df}{dy}y + \frac{df}{dz}z$	$\mathrm{E}(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda\,\mathrm{E}(S,V,N) \Longrightarrow E = \frac{\partial E}{\partial S}S + \frac{\partial E}{\partial V}V + \frac{\partial E}{\partial N}N$
Jacobi-Trafo	$\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = \det\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial t}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_x \end{pmatrix} = \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial t}{\partial x}\right)_y$	$\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(t,s)}{\partial(y,x)}$ $\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = -\frac{\partial(s,t)}{\partial(y,x)}$ $\frac{\partial(x,y)}{\partial(s,t)} = \left(\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)}\right)^{-1}$ $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)}\frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)}$
$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g$ umwandeln, Variante (1)	$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy \ldots (1)\quad g = const. \Longrightarrow dg = 0 \Longrightarrow \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x dy = 0 \Longrightarrow dy = -\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1} dx \stackrel{(1)}{\Longrightarrow}$ $df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1} dx \Big\vert \cdot \frac{1}{dx} \Longrightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1}$	
$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g$ Umwandeln, Variante (2) (Jacobi-Trafo)	$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)}\frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} = \det\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x \end{pmatrix} \frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y\right) \frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} \Big\vert\ \frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(y,x)}{\partial(g,x)} = \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x \Longrightarrow$ $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y\right)\left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1}$	
Kreisrelation	$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_g \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y = -1$	Poisson-Klammer: $\left\{\rho\left(\underline{p},\underline{q}\right), \mathrm{H}\left(\underline{p},\underline{q}\right)\right\} = \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$
Legendre-Trafo	Trafo $\mathrm{f}(x) \rightarrow \mathrm{g}(\mathrm{p}(x))$ mit $p = \frac{\partial f}{\partial x}$ $\Longrightarrow$Var.1: $\mathrm{g}(p) = \mathrm{f}(\mathrm{x}(p)) - p\,\mathrm{x}(p)$ Var.2: $\mathrm{g}(p) = p\,\mathrm{x}(p) - \mathrm{f}(\mathrm{x}(p))$ Bsp.: $\mathrm{E}(S;V,N) \rightarrow \mathrm{F}(T;V,N)$ mit $T = \frac{\partial E}{\partial S} \Longrightarrow \mathrm{F}(T;V,N) = \mathrm{E}(S(T;V,N);V,N) - T\,S(T;V,N)$	
D-dim. Harm. Oszillator	$H = \sum_{i=1}^{D} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q_i^2}{2}$	Entartung der Besetzung $\langle n_i \rangle$: $g_i = \binom{D+i-1}{i} = \frac{(D+i-1)!}{i!(D-1)!}$
Binomial-verteilung	Wahrscheinlichkeit k von N Teilchen im Volumen V_1 zu finden wenn $p_1 = V_1/V_{ges}$: $w(k\vert p_1, N) = \binom{N}{k} p^k (1-p_1)^{N-k}$	Funktion auf Matrixoperator: $\mathrm{f}(\hat{A}) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{f}(\lambda_i) \frac{\vert n_i\rangle\langle n_i\vert}{\langle n_i \vert n_i\rangle}$
Eigenwerte	Löse $\det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0$.	Numerische Vielfachheit („Entartung") n_i für $\lambda_i = a$: Anzahl EW mit gleichem Wert a.
Eigenvektoren	EV $\vec{v}_i$ zu EW λ_i: $\left[\begin{array}{cccc\|c} x-\lambda_i & x & x & x & 0 \\ x & x-\lambda_i & x & x & 0 \\ x & x & x-\lambda_i & x & 0 \\ x & x & x & x-\lambda_i & 0 \end{array}\right] \xrightarrow{Gauss} \left[\begin{array}{cccc\|c} 1 & 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \Longrightarrow \begin{array}{l} x_1 = -at \\ x_2 = 0 \\ x_3 = s \\ x_4 = t \end{array} \Longrightarrow \vec{v}_i = s\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} + t\begin{pmatrix}-a\\0\\0\\1\end{pmatrix}$	