KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTE MATERIE

Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie) SS 2024

Prof. Dr. A. D. Mirlin

Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Blatt 6, Abgabe bis 15.07.2024

Besprechung 19.07.2024

---

1. Geburt und Tod $(10 + 10 + 10 + 10 + 10 = 40$ Punkte $+10$ Bonuspunkte)

Betrachten Sie ein System mit einer Population von n Bakterien. Nehmen Sie an, dass die Wahrscheinlichkeit für Geburt und Tod einer Bakterie jeweils proportional zu n ist. Das führt zu folgender Master-Gleichung, die auch in den Vorlesungen (Kapitel 3, Abschnitt 3.1, Seite 6) besprochen wurde:

$$\frac{\partial \rho(n,t)}{\partial t} = (n-1) \cdot \lambda \cdot \rho(n-1,t) + (n+1) \cdot \mu \cdot \rho(n+1,t) - (\lambda + \mu) \cdot n \cdot \rho(n,t), \quad (1)$$

wobei λ bzw. μ die Geburts- und Sterberate sind. $\rho(n,t)$ ist die Wahrscheinlichkeit einer Populationsgröße von n zum Zeitpunkt t.

Wir können die Momente von $\rho(n,t)$ mit Hilfe einer erzeugenden Funktion

$$F(z,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \rho(n,t). \quad (2)$$

bestimmen (alternativ zur Definition der charakteristischen Funktion $\phi(k,t)$ mit $z \leftrightarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}$ aus der Vorlesung), die wir im Folgenden berechnen.

Um eine negative Population zu verhindern, fordern wir $\rho(n,t) = 0$ wenn $n < 0$.

(a) Leiten Sie Relationen zwischen den Erwartungswerten $\langle n(t) \rangle$, $\langle n^2(t) \rangle$ und der erzeugenden Funktion her.
Hinweis: Was ist für die gegebene erzeugende Funktion das Äquivalent zum in den Vorlesungen besprochen Limit $k \to 0$ (Seite 5 in Skript-Abschnitt 3.1)?

(b) Leiten Sie, ausgehend von der Master-Gleichung, die folgende Differentialgleichung für F her:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = (z-1)(\lambda z - \mu) \frac{\partial F}{\partial z}. \quad (3)$$

(c) Mit der Methode der Charakteristiken kann man Gleichung (3) lösen. Zeigen Sie durch explizites Einsetzen, dass Funktionen der Form $F(z,t) = f(x(z,t))$ mit

$$x(z,t) := \left(\frac{\lambda(z-1)}{\lambda z - \mu} \mathrm{e}^{(\lambda - \mu)t} \right), \quad (4)$$

die Gleichung lösen.

(d) Bestimmen Sie nun eine explizite Lösung für $F(z,t)$, unter der Ausgangsbedingung dass die *Population* zum Zeitpunkt $t = 0$ m ist.

(e) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle n \rangle$ und die Varianz $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ mit der expliziten Lösung aus Teilaufgabe d). Diskutieren Sie das Limit $t \to \infty$.

2. Zwei-Niveau-Atom $(10 + 10 + 5 + 15 + 5 + 5 = 35$ Punkte $+ 15$ Bonuspunkte$)$

Betrachten Sie ein Atom, dass sich in einem von zwei Zuständen mit den Energien E_1, E_2 (wobei $E_2 > E_1$) befinden kann. Die Wahrscheinlichkeiten, das Atom zum Zeitpunkt t in diesen Zuständen zu finden, werden als $p_i(t)$ bezeichnet ($i \in \{1, 2\}$; $p_1 + p_2 = 1$). Die Wechselwirkung des Atoms mit einem elektromagnetischen Feld führe zu Übergängen zwischen den Zuständen mit den zeitlich konstanten Raten $\gamma_{1\to2}$ und $\gamma_{2\to1} \geq \gamma_{1\to2}$.

(a) Geben Sie die Master-Gleichungen für die $p_i(t)$ an. Lösen Sie die Master-Gleichungen mit der Anfangsbedingung $p_1(t = 0) := p_0$.

(b) Betrachten Sie nun ein Ensemble aus N Atomen, die jeweils von diesen Master-Gleichungen beschrieben werden. Drücken Sie eine effektive Temperatur $T(t)$ des Systems durch $p_2(t)$ und E_1, E_2 aus:

Bestimmen hierzu zunächst die Entropie des Systems in Abhängigkeit von N und p_2; sowie den Erwartungswert der Gesamtenergie E in Abhängigkeit von E_1, E_2, N und p_2. Definieren Sie dann die effektive Temperatur in Analogie zur thermodynamischen Definition

$$T^{-1} = \frac{\partial S(E)}{\partial E} \tag{5}$$

und berechnen Sie diese mit Hilfe Ihrer Ausdrücke für $E(p_2)$ und $S(p_2)$.

(c) Was passiert im Fall $\gamma_{2\to1} = \gamma_{1\to2}$ mit der Temperatur für $t \to \infty$?

(d) Bisher haben wir die Raten $\gamma_{1\to2}$ und $\gamma_{2\to1}$ als von einem externen Feld vorgegeben betrachtet. Jetzt wollen wir ein Ensemble der Atome betrachten, das sich im thermischen Gleichgewicht mit einem quantisierten elektromagnetischen Feld mit Temperatur T befindet. Finden Sie die Übergangsraten als Funktion der Temperatur für diesen Fall.

Der Hamilton-Operator eines Photons lautet

$$H_{\text{photon}} = \hbar \int \mathrm{d}\omega'\, \omega' (a^\dagger_{\omega'} a_{\omega'} + 1/2) \tag{6}$$

wobei $a_{\omega'}$ / $a^\dagger_{\omega'}$ ein Photon mit Energie $\hbar\omega'$ vernichten / erzeugen. Die Kopplung zwischen Photon und Atom wird durch den Hamilton-Operator

$$H_{\text{photon}-\text{atom}} = \int \mathrm{d}\omega' \left(b a^\dagger_{\omega'} + b^\dagger a_{\omega'} \right) \tag{7}$$

beschrieben, wobei die Operatoren b und $b^\dagger$ den Zustand des Atoms senken / heben. Nehmen Sie an, dass die thermischen Eigenschaften des Strahlungsfeldes unabhängig von den Atomen sind.

Hinweis: Überlegen Sie sich, wie Anfangs- und Endzustand der relevanten Übergänge aussehen müssen. Die Übergangsraten sind proportional zu den thermische Mitteln des Matrixelement-Betragsquadrats der Kopplung mit diesen Zuständen.

(e) Betrachten Sie nun die Übergangsraten, die in der vorherigen Teilaufgabe hergeleitet wurden. Laut Vorlesung erfüllen Übergangsraten $W_{n'\to n}, W_{n\to n'}$ die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (Skript, Abschnitt 3.1, Seite 7), wenn gilt

$$\frac{W_{n'\to n}}{W_{n\to n'}} = \exp\left(-\frac{E(n) - E(n')}{k_{\mathrm{B}} T} \right). \tag{8}$$

Zeigen Sie, dass die gegebenen Raten die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erfüllen und finden Sie p_1, p_2 für $t \to \infty$.

(f) Zeigen Sie, dass die in Teilaufgabe b) bestimmte effektive Temperatur (basierend auf den erwarteten Besetzungen der Atom-Zustände) im Gleichgewichtsfall aus Teilaufgabe d) und e) der tatsächlichen Temperatur entspricht.

3. Fokker-Planck-Gleichung $(5 + 5 + 10 + 10 = 25$ Punkte $+5$ Bonuspunkte$)$

Betrachten Sie ein Teilchen auf einem eindimensionalen Gitter mit Gitterkonstante a, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch die Verteilung $\rho_i(t_n)$ beschrieben wird. Hierbei nummeriert $i \in [1, L]$ die Gitterplätze, und $t_n = n\Delta t$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots$ beschreibt diskrete Zeitschritte. Die Zeitentwicklung von $\rho_i(t_n)$ wird beschrieben durch die Matrix M, so dass

$$\rho_i(t + \Delta t) = \sum_j M_{i,j} \rho_j(t). \tag{9}$$

Die Komponenten der Matrix sind gegeben durch

$$M_{i,j} = \delta_{i,j} p_i + \delta_{i+1,j} \bar{p}_{i+1}/2 + \delta_{i-1,j} \bar{p}_{i-1}/2 \tag{10}$$

$$\bar{p}_i := 1 - p_i \tag{11}$$

mit $p_i \in [0, 1)$. Dabei betrachten wir periodische Randbedingungen, es gilt also $i = 0 \to i = L$ und $i = L + 1 \to i = 1$. Es gelte $\sum_i \rho_i(0) = 1$.

In dieser Aufgabe untersuchen wir die Fokker-Planck Gleichung zu diesem System. Wir nehmen dazu an, dass sich die Wahrscheinlichkeit p_i nur langsam von Gitterplatz zu Gitterplatz ändert, so dass wir im Limit $a \to 0$ eine glatte Funktion $p(x) =: p_{x/a}$ definieren können.

(a) Die Warscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo auf dem Gitter zu finden, soll zeitunabhängig sein. Leiten Sie eine entsprechende Bedingung für die Matrix M her, und zeigen Sie dass die gegebene Matrix diese Bedingung erfüllt.

(b) Zeigen Sie, dass die Driftgeschwindigkeit (siehe Vorlesung, Abschnitt 3.2, Seite 10) 0 ist und erklären Sie dieses Ergebnis physikalisch.

(c) Leiten Sie die Diffusionsmatrix des Systems her.

(d) Betrachten Sie nun die resultierende Fokker-Planck-Gleichung. Finden Sie die stationäre Lösung und interpretieren Sie diese physikalisch.

4. Bonusaufgabe: Boltzmann-Gleichung für Bosonen
$(10 + 5 + 5 + 15 + 15 = 50$ Bonus-Punkte$)$

In dieser Aufgabe untersuchen wir die *Entropieproduktion*

$$Q := \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \tag{12}$$

mit der Boltzmanngleichung für ein System aus Bosonen—ähnlich wie im Skript (Kapitel 3, Abschnitt 3.4, Seite 21) die Entropieproduktion für ein fermionisches System untersucht wurde. Hierfür müssen wir zunächst die Entropie $S(t)$ in einem bosonischen System (das sich nicht unbedingt im Gleichgewicht befindet) durch die Verteilungsfunktion $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ ausdrücken. (Siehe Vorlesung für den entsprechenden Ausdruck für Fermionen.) Danach zeigen wir, dass auch für Bosonen $Q \geq 0$ gilt; und letztendlich betrachten wir den Fall $Q = 0$.

(a) Wir definieren die Entropie im Nichtgleichgewicht (in Analogie zur mikrokanonischen Definition) als

$$S = k_{\mathrm{B}} \ln(\mathcal{N}) \tag{13}$$

wobei $\mathcal{N}$ die Anzahl der dem System zur Verfügung stehenden Mikrozustände ist. Nun teilen wir die Einteilchenzustände des Systems in Gruppen ein, wobei sich in der j-ten Gruppe $\nu_j \gg 1$ Einteilchenzustände befinden, die durch $N_j \gg 1$ Teilchen besetzt werden. Die Anzahl an Mikrozuständen innerhalb einer Gruppe $\mathcal{N}_j$ ist dabei durch die Anzahl an Möglichkeiten gegeben, die Teilchen der Gruppe über ihre Einteilchenzustände zu verteilen. Nehmen Sie an, dass die Gruppen voneinander unabängig sind und drücken Sie S durch $n_j := N_j/\nu_j$ und ν_j aus. Zeigen Sie, dass die Entropie für $\nu_j \gg 1$, $N_j \gg 1$ durch

$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_j \nu_j \left[n_j \ln(n_j) - (1+n_j) \ln(1+n_j) \right] \tag{14}$$

gegeben ist.

Hinweis: Für die Kombinatorik ist dieser Wikipedia-Artikel nützlich.

(b) Im quasiklassischen Fall, für den die Boltzmann-Gleichung gilt, identifizieren wir die Zustandsgruppen mit den Phasenraumvolumenelementen

$$\sum_j \nu_j \to \int \frac{\mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \tag{15}$$

$$n_j \to f(\vec{k}, \vec{r}, t). \tag{16}$$

Nutzen Sie den Ausdruck aus der vorherigen Teilaufgabe, um damit die Entropie durch $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ auszudrücken.

(c) Nutzen Sie die Boltzmann-Gleichung, um $\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}$ durch $I[f]$ und f auszudrücken.

(d) Für ein fermionisches System gilt laut Vorlesung $Q \geq 0$. Zeigen Sie, dass das auch für Bosonen gilt.

Das Stoßintegral ist im bosonischen Fall gegeben durch

$$I[f]_k = -\int \frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{d}^3k''}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{d}^3k'''}{(2\pi)^3} W_{kk' \to k''k'''} \left[f_k f_{k'} (1+f_{k''})(1+f_{k'''}) - f_{k''} f_{k'''} (1+f_k)(1+f_{k'}) \right] \tag{17}$$

($f_k \equiv f(\vec{k})$, alle r-Argumente identisch). Für das Wechselwirkungspotential gelte

$$W_{kk' \to k''k'''} = W_{k''k''' \to kk'} = W_{kk' \to k'''k''}, \qquad W > 0. \tag{18}$$

(e) Nehmen Sie an, dass das Stoßintegral Energie und Teilchenzahl erhält. Fordern Sie $Q = 0$ und nutzen Sie Energie- und Teilchenzahlerhaltung während der Stoßprozesse, um eine Form von $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ herzuleiten, die zu minimaler Entropieproduktion $Q = 0$ korrespondiert.

Hinweis: Das Stoßintegral vermittelt zwischen Zuständen mit verschiedenem $\vec{k}$. Überlegen Sie sich, welche Bedingungen Energie- und Teilchenzahlerhaltung für das Stoßintegral implizieren.

Bitte denken Sie daran, sich im Campus-System zur Klausur und zur Vorleistung anzumelden!