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)?

Lösung: Durch ein- bzw. zweifaches Ableiten erhalten wir nach dem Limit $z \to 1$ die gewünschten Ausdrücke:

$$\langle n(t)\rangle = \lim_{z\to 1}\frac{\partial F}{\partial z} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\rho(n,t) = \sum_{n=0}^{\infty} n\rho(n,t), \quad (3)$$

$$\langle n^2(t)\rangle - \langle n(t)\rangle = \lim_{z\to 1}\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}(n^2-n)\rho(n,t) = \sum_{n=0}^{\infty}(n^2-n)\rho(n,t). \quad (4)$$

Es folgt

$$\langle n^2(t)\rangle = \lim_{z\to 1}\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \lim_{z\to 1}\frac{\partial F}{\partial z}. \quad (5)$$

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

$$\frac{\partial F}{\partial t} = (z-1)(\lambda z - \mu)\frac{\partial F}{\partial z}. \tag{6}$$

Lösung: Wir multiplizieren die Master-Gleichung mit z^n und summieren:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \frac{\partial \rho(n,t)}{\partial t} = \frac{\partial F(z,t)}{\partial t} \tag{7}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \Big[\lambda(n-1)\rho(n-1,t) + \mu(n+1)\rho(n+1,t) - (\lambda+\mu)n\rho(n,t)\Big]. \tag{8}$$

Wir drücken die anderen Terme durch Ableitungen nach z aus:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n (n-1)\rho(n-1,t) = z^2 \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{n-1}\rho(n-1,t) = z^2 \frac{\partial F}{\partial z}, \tag{9}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n (n+1)\rho(n+1,t) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{n+1}\rho(n+1,t) = \frac{\partial F}{\partial z}, \tag{10}$$

und

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n n\rho(n,t) = z\frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \rho(n,t) = z\frac{\partial F}{\partial z}. \tag{11}$$

Einfügen gibt das gefragte Resultat:

$$\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} = \underbrace{\left(\lambda z^2 + \mu - z(\lambda+\mu)\right)}_{=(z-1)(\lambda z - \mu)} \frac{\partial F(z,t)}{\partial z} \tag{12}$$

(c) Mit der Methode der Charakteristiken kann man Gleichung (6) lösen. Zeigen Sie durch explizites Einsetzen, dass Funktionen der Form $F(z,t) = f(x(z,t))$ mit

$$x(z,t) := \left(\frac{\lambda(z-1)}{\lambda z - \mu} \mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t}\right), \tag{13}$$

die Gleichung lösen.

Lösung: Wir haben

$$\frac{\partial f(x)}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial f(x)}{\partial x}}_{=:f'(x)} \frac{\partial x(z,t)}{\partial t} = f'(x) \frac{\lambda(z-1)(\mu-\lambda)\mathrm{e}^{t(\lambda-\mu)}}{\mu - \lambda z} \tag{14}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial z} = f'(x) \frac{\lambda(\lambda-\mu)\mathrm{e}^{t(\lambda-\mu)}}{(\mu-\lambda z)^2} \tag{15}$$

und da

$$\frac{\lambda(z-1)(\mu-\lambda)\mathrm{e}^{t(\lambda-\mu)}}{\mu-\lambda z} = \frac{(z-1)(\lambda z-\mu)\left(\lambda(\lambda-\mu)\mathrm{e}^{t(\lambda-\mu)}\right)}{(\mu-\lambda z)^2} \tag{16}$$

ist die Gleichung tatsächlich erfüllt.

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

Lösung: Die Anfangsbedingung ist

$$\rho(n, t = 0) = \delta_{n,m}. \tag{17}$$

Daher finden haben wir eine Bedingung für die funktionale Form von f

$$F(z, t = 0) \stackrel{!}{=} z^m \tag{18}$$

$$\Rightarrow f\left(\frac{\lambda(z-1)}{\lambda z - \mu}\right) \stackrel{!}{=} z^m \tag{19}$$

Wir benutzen eine Substitution:

$$u = \frac{\lambda(z-1)}{\lambda z - \mu} \Leftrightarrow z = \frac{\lambda - u\mu}{\lambda - u\lambda} \tag{20}$$

Dann bekommen wir:

$$f(u) = \left(\frac{\lambda - u\mu}{\lambda - u\lambda}\right)^m \tag{21}$$

damit haben wir eine Explizite Form für die Lösung:

$$F(z,t) = \left(\frac{\mu\frac{\lambda(z-1)}{\lambda z-\mu}\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t} - \lambda}{\lambda\frac{\lambda(z-1)}{\lambda z-\mu}\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t} - \lambda}\right)^m \tag{22}$$

$$= \left(\frac{\mu(z-1)\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t} - \lambda z + \mu}{\lambda(z-1)\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t} - \lambda z + \mu}\right)^m. \tag{23}$$

(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 $t \to \infty$.

Lösung: Benutzung der in Teilaufgabe a) hergeleiteten Ausdrücke für die Momente gibt:

$$\langle n\rangle = \lim_{z\to 1}\frac{\partial F}{\partial z} = m\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t}. \tag{24}$$

$$\langle n^2\rangle = \lim_{z\to 1}\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \langle n\rangle, \tag{25}$$

$$\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = \lim_{z\to 1}\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \langle n\rangle - \langle n\rangle^2 \tag{26}$$

$$= m\frac{(\lambda+\mu)}{\lambda-\mu}\left(\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t} - 1\right)\mathrm{e}^{(\lambda-\mu)t}. \tag{27}$$

Wir sehen, dass wenn $\lambda > \mu$, $\langle n\rangle$ divergiert, und im Fall $\lambda < \mu$ geht $\langle n\rangle \to 0$. Für $\lambda > \mu$ nimmt auch die Varianz unbeschränkt zu; für $\lambda < \mu$ geht die Varianz wieder nach null wenn alle Bakterien tot sind. Das unbeschränkte Wachstum der Population wird in einer realistischen Bakterienpopulation z.B. durch begrenzte Ressourcen verhindert, die in unserer Gleichung nicht berücksichtigt wurden.

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 $p_1(t = 0) := p_0$.

Lösung: Die Mastergleichungen lauten

$$\frac{\partial p_1(t)}{\partial t} = -\gamma_{1\to2} p_1(t) + \gamma_{2\to1} p_2(t) \tag{28}$$

$$\frac{\partial p_2(t)}{\partial t} = \gamma_{1\to2} p_1(t) - \gamma_{2\to1} p_2(t) \tag{29}$$

Wenn wir die Bedingung $p_1 + p_2 = 1$ in der Form $p_2(t) = 1 - p_1(t)$ in die erste Gleichung einsetzen, erhalten wir

$$\frac{\partial p_1(t)}{\partial t} = -\gamma_{1\to2} p_1(t) + \gamma_{2\to1}(1 - p_1(t)) \tag{30}$$

$$= p_1(t) \underbrace{(-\gamma_{1\to2} - \gamma_{2\to1})}_{=:-\gamma} + \gamma_{2\to1}. \tag{31}$$

Diese Gleichung wird von dem Ansatz

$$p_1(t) = A \exp(-\gamma t) + \frac{\gamma_{2\to1}}{\gamma} \tag{32}$$

gelöst. Wir bestimmen A mit der Anfangsbedingung $p_1(t = 0) = p_0$:

$$p_1(t) = \left(p_0 - \frac{\gamma_{2\to1}}{\gamma}\right) \exp(-\gamma t) + \frac{\gamma_{2\to1}}{\gamma} \tag{33}$$

und mit $p_2(t) = 1 - p_1(t)$ erhalten wir

$$p_2(t) = \left(\frac{\gamma_{2\to1}}{\gamma} - p_0\right) \exp(-\gamma t) + \frac{\gamma_{1\to2}}{\gamma} \tag{34}$$

(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

$$T^{-1} = \frac{\partial S(E)}{\partial E} \tag{35}$$

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

Lösung: Die Entropie ist definiert als

$$S = -\sum_i p_i \log(p_i) \tag{36}$$

Wobei die Summe über alle Mikrozustände geht und p_i die Wahrscheinlichkeit des Mikrozustandes i ist. In unserem System ist ein Mikrozustand dadurch beschrieben, welche der Atome in welchem Zustand sind. Ein gegebener Mikrozustand mit N_1 (bestimmten) Atomen in Zustand 1 und entsprechend $N - N_1$ Atomen in Zustand 2 hat Wahrscheinlichkeit

$$\mathcal{P}_{N_1} = p_1^{N_1} p_2^{N-N_1}. \tag{37}$$

N_1 kann Werte zwischen 0 und N annehmen.
Da es $\binom{N}{N_1}$ verschiedene Mikrozustände mit N_1 Atomen im Zustand 1 gibt, lautet der Ausdruck für die Entropie

$$\begin{aligned}
S &= \sum_{N_1=0}^{N} \binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1} \log(\mathcal{P}_{N_1}) && (38)\\
&= \sum_{N_1=0}^{N} \binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1} \left[N_1 \log(p_1) + (N - N_1) \log(p_2)\right] && (39)\\
&= N \left[p_1 \log(p_1) + \log(p_2) - p_1 \log(p_2)\right] && (40)\\
&= N \left[p_1 \log(p_1) + p_2 \log(p_2)\right] && (41)
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir für das dritte Gleichzeichen verwendet, dass

$$\begin{aligned}
\sum_{N_1=0}^{N} \binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1} &= 1 && (42)\\
\sum_{N_1=0}^{N} \binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1} N_1 &= N p_1. && (43)
\end{aligned}$$

($\binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1}$ beschreibt eine Binomialverteilung.)
Wir berechnen auch noch den Erwartungswert der Gesamtenergie:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \sum_{N_1=0}^{N} \binom{N}{N_1} \mathcal{P}_{N_1} \left(N_1 E_1 + (N - N_1) E_2\right) && (44)\\
&= N p_1 E_1 + N E_2 - N p_1 E_2 && (45)\\
&= N(p_1 E_1 + p_2 E_2) && (46)
\end{aligned}$$

Also folgt für die effektive Temperatur

$$T^{-1}(t) = \frac{\partial S(E)}{\partial E} = \frac{\partial S(p_2)}{\partial p_2} \frac{\partial p_2(E)}{\partial E} = \frac{k_\mathrm{B}}{E_2 - E_1} \log\left(\frac{1 - p_2(t)}{p_2(t)}\right). \tag{47}$$

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

$$p_2, p_1 \to \frac{1}{2} \tag{48}$$

$$\Rightarrow T \to \infty. \tag{49}$$

Die hohe Temperatur wird durch die vorgegebenen Raten verursacht.

(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

$$H_{\text{photon}} = \hbar \int \mathrm{d}\omega'\, \omega' (a^\dagger_{\omega'} a_{\omega'} + 1/2) \tag{50}$$

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

$$H_{\text{photon}-\text{atom}} = \int \mathrm{d}\omega' \left(b a^\dagger_{\omega'} + b^\dagger a_{\omega'} \right) \tag{51}$$

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.
Lösung: Anfangs- und Endzustand des Atomes können jeweils einer der beiden Atom-Zustände sein. Jenachdem geht das Atom dann in den höher oder niedriger angeregten Zustand über. Ein solcher Übergang wird jetzt durch einen gleichzeitigen entsprechenden Übergang im elektromagnetischen Feld ermöglicht. Wir haben also als mögliche Übergänge

$$|i_1\rangle := |1\rangle \otimes |n_\omega\rangle \to |2\rangle \otimes |n_\omega - 1\rangle =: |f_1\rangle \tag{52}$$

$$|i_2\rangle := |2\rangle \otimes |n_\omega\rangle \to |1\rangle \otimes |n_\omega + 1\rangle =: |f_2\rangle \tag{53}$$

Wobei $|i\rangle, i \in \{1, 2\}$ die Zustände des Atoms sind, und $|n_\omega\rangle$ die Anzahl von Photonen im Zustand mit Energie $\hbar\omega := E_2 - E_1$. Für die Matrix-Elemente dieser Zustände mit dem Hamilton-Operator gilt

$$|\langle i_1| H_{\text{photon}-\text{atom}} |f_1\rangle|^2 = |\langle 1| b |2\rangle \langle n_\omega| a^\dagger |n_\omega - 1\rangle|^2 = |\langle 1| b |2\rangle|^2 n_\omega \tag{54}$$

$$|\langle i_2| H_{\text{photon}-\text{atom}} |f_2\rangle|^2 = |\langle 2| b^\dagger |1\rangle \langle n_\omega| a_\omega |n_\omega + 1\rangle|^2 = |\langle 1| b |2\rangle|^2 (n_\omega + 1) \tag{55}$$

Jetzt müssen wir noch das thermische Mittel der Ergebnisse bilden. Da Photonen Bosonen sind, ist das Mittel der Besetzungszahl durch die Bose-Funktion gegeben. Wir finden

$$\gamma_{1\to2} = \Gamma n_{\mathrm{B}}(\hbar\omega) \tag{56}$$

$$\gamma_{2\to1} = \Gamma + \Gamma n_{\mathrm{B}}(\hbar\omega), \tag{57}$$

wobei Γ ein von der Temperatur unabhängiger Faktor ist.

(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

$$\frac{W_{n'\to n}}{W_{n\to n'}} = \exp\left(-\frac{E(n)-E(n')}{k_\mathrm{B}T}\right). \tag{58}$$

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

Lösung: Detailliertes Gleichgewicht:

$$\frac{\gamma_{1\to 2}}{\gamma_{2\to 1}} = \frac{n_\mathrm{B}(\hbar\omega)}{1+n_\mathrm{B}(\hbar\omega)} = \exp(-\beta\hbar\omega) = \exp(-\beta(E_2-E_1)). \tag{59}$$

p_1, p_2 für $t \to \infty$:

$$p_1 \to \frac{1+n_\mathrm{B}(\hbar\omega)}{1+2n_\mathrm{B}(\hbar\omega)} = \frac{1}{1+\exp(-\beta\hbar\omega)} \tag{60}$$

$$p_2 = 1-p_1 = \frac{1}{1+\exp(\beta\hbar\omega)} \tag{61}$$

(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.

Lösung: Wir verwenden den Zusammenhang aus Teilaufgabe b) und setzen den Ausdruck für p_2 aus Aufgabe e) ein:

$$T^{-1} = \frac{k_\mathrm{B}}{E_1-E_2}\log\left(\frac{1-p_2}{p_2}\right) \tag{62}$$

$$= \frac{k_\mathrm{B}}{E_1-E_2}\log\left(\frac{1+\exp(\beta\hbar\omega)}{1+\exp(-\beta\hbar\omega)}\right) \tag{63}$$

$$\Leftrightarrow \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right) = \frac{1+\exp(\beta\hbar\omega)}{1+\exp(-\beta\hbar\omega)} \checkmark \tag{64}$$

Also entspricht die Temperaturdefinition aus Aufgabe b) im thermischen Gleichgewicht der tatsächlichen Temperatur.

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

$$\rho_i(t+\Delta t) = \sum_j M_{i,j}\rho_j(t). \tag{65}$$

Die Komponenten der Matrix sind gegeben durch

$$M_{i,j} = \delta_{i,j}p_i + \delta_{i+1,j}\bar{p}_{i+1}/2 + \delta_{i-1,j}\bar{p}_{i-1}/2 \tag{66}$$

$$\bar{p}_i := 1-p_i \tag{67}$$

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.

Lösung:

$$\sum_i \rho_i(t + \Delta t) \stackrel{!}{=} 1 \tag{68}$$

$$\Rightarrow \sum_i \sum_j M_{i,j} \rho_j(t) \stackrel{!}{=} 1 \tag{69}$$

$$\Rightarrow \sum_j \left(\sum_i M_{i,j} \right) \rho_j(t) \stackrel{!}{=} 1 \tag{70}$$

Es folgt

$$\sum_i M_{i,j} \stackrel{!}{=} 1. \tag{71}$$

Wir überprüfen das für die gegebene Matrix:

$$\sum_i M_{i,j} = p_j + 2\bar{p}_j/2 = 1\checkmark \tag{72}$$

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

Lösung: Mit der Definition aus der Vorlesung:

$$\begin{aligned}
\alpha^{(1)}(x = a \cdot i, t) &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \left. \langle X(t + \Delta t) - X(t) \rangle \right|_{\{X(t) = a \cdot i\}} && (73)\\
&= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{a}{\Delta t} \left. \sum_k k(\rho_k(t + \Delta t) - \rho_k(t)) \right|_{\rho_j(t) = \delta_{i,j}} && (74)\\
&= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{a}{\Delta t} \sum_k k(M_{k,i} - \delta_{k,i}) && (75)\\
&= \frac{1}{\Delta t} (p_i \cdot a \cdot i + (1 - p_i)/2(a(i + 1) + a(i - 1)) - a \cdot i) && (76)\\
&= 0. && (77)
\end{aligned}$$

Das war zu erwarten, da es in diesem System keine Vorzugsrichtung gibt: Für jeden Gitterplatz sind Übergänge nach rechts und links gleich wahrscheinlich.

(c) Leiten Sie die Diffusionsmatrix des Systems her.

Lösung:

$$\alpha^{(2)}(x = a \cdot i, t) = \frac{1}{\Delta t} \left\langle [X(t + \Delta t) - X(t)]^2 \right\rangle \Big|_{X(t)=x} \tag{78}$$

$$= \frac{a^2}{\Delta t} \left(\frac{1 - p_i}{2} (1 + 1) \right) \tag{79}$$

$$= \frac{a^2}{\Delta t} (1 - p_i) \tag{80}$$

Hier haben wir verwendet, dass $X(t + \Delta t)$ nur drei mögliche Werte annehmen kann, nachdem $X(t) = a \cdot i$ initialisiert wurde: Mit Wahrscheinlichkeit p_i ist $X(t+\Delta t) = a \cdot i$ und jeweils mit Wahrscheinlichkeit $\bar{p}_i$ $a(i-1)$ oder $a(i+1)$. Der Mittelwert kann daher gebildet werden als

$$\alpha^{(2)}(x = a \cdot i, t) = \frac{1}{\Delta t} \left(p_i (a \cdot i - a \cdot i)^2 + \frac{\bar{p}_i}{2} ((a \cdot (i + 1 - i))^2 + (a \cdot (i - 1 - i))^2) \right). \tag{81}$$

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

Lösung: Die Fokker-Planck-Gleichung des Systems lautet

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha^{(2)}(x,t) \rho(x,t). \tag{82}$$

$\alpha^{(1)} = 0$ und $\alpha^{(2)}(x,t) = \alpha^{(2)}(x) = a^2(1 - p(x))/\Delta t$ haben wir in der letzten Teilaufgabe gefunden.

Stationäre Lösung bedeutet, dass

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = 0. \tag{83}$$

Wir haben also

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha^{(2)}(x) \rho_s(x) = 0 \tag{84}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \alpha^{(2)}(x) \rho_s(x) = \text{konst} \tag{85}$$

$$\Rightarrow \alpha^{(2)}(x) \rho_s(x) = cx + b \tag{86}$$

Periodische Randbedingung:

$$\rho_s(x = a) \stackrel{!}{=} \rho_s(x = L \cdot a) \tag{87}$$

$$\Rightarrow ca + b \stackrel{!}{=} caL + b \tag{88}$$

Also muss $c = 0$ sein. Die Lösung ist daher

$$\alpha^{(2)}(x) \rho_s(x) = \text{konst} \tag{89}$$

$$\Rightarrow \rho_s(x) \propto \frac{1}{\alpha^{(2)}(x)} = \frac{\Delta t}{a^2(1 - p(x))}. \tag{90}$$

Im stationären Fall ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen auf einem bestimmten Platz zu finden also größer, je geringer die Wahrscheinlichkeit ist, diesen Gitterplatz zu verlassen, nachdem er aufgesucht wurde.

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

In dieser Aufgabe untersuchen wir die *Entropieproduktion*

$$Q := \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \tag{91}$$

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

$$S = k_{\mathrm{B}} \ln(\mathcal{N}) \tag{92}$$

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

$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_j \nu_j \left[n_j \ln(n_j) - (1 + n_j) \ln(1 + n_j)\right] \tag{93}$$

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

Lösung: Da die Gruppen unabhängig voneinander sind, gilt

$$\mathcal{N} = \prod_j \mathcal{N}_j \tag{94}$$

$$\Rightarrow S = k_{\mathrm{B}} \sum_j \ln(\mathcal{N}_j). \tag{95}$$

Die Anzahl der in Gruppe j zur Verfügung stehenden Mikrozustände entspricht der Anzahl an Möglichkeiten, N_j Bosonen über ν_j Zustände zu verteilen. Da sich beliebig viele Bosonen im gleichen Einteilchenzustand befinden können, entspricht das dem kombinatorischen Problem, N_j identische Bälle auf ν_j Boxen zu verteilen:

$$\mathcal{N}_j = \frac{(\nu_j + N_j - 1)!}{N_j!(\nu_j - 1)!}. \tag{96}$$

(cf. `https://en.wikipedia.org/wiki/Stars_and_bars_(combinatorics)`). Wir nutzen die Stirling-Näherung und finden

$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_j \nu_j \left[n_j \ln(n_j) - (1 + n_j) \ln(1 + n_j)\right]. \tag{97}$$

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

$$\sum_j \nu_j \to \int \frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \tag{98}$$

$$n_j \to f(\vec{k},\vec{r},t). \tag{99}$$

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

Lösung:

$$S(t) = -k_\mathrm{B}\int \frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\left[f(\vec{k},\vec{r},t)\ln\Big(f(\vec{k},\vec{r},t)\Big) - (1+f(\vec{k},\vec{r},t))\ln\Big(1+f(\vec{k},\vec{r},t)\Big)\right]. \tag{100}$$

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

Lösung:

$$Q = \frac{\mathrm{d}S(t)}{\mathrm{d}t} \tag{101}$$

$$= -k_\mathrm{B}\int \frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\ln\left(\frac{f(\vec{k},\vec{r},t)}{1+f(\vec{k},\vec{r},t)}\right)\frac{\mathrm{d}f(\vec{k},\vec{r},t)}{\mathrm{d}t} \tag{102}$$

$$= -k_\mathrm{B}\int \frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\ln\left(\frac{f(\vec{k},\vec{r},t)}{1+f(\vec{k},\vec{r},t)}\right)I[f] \tag{103}$$

(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

$$I[f]_k = -\int \frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}^3k''}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}^3k'''}{(2\pi)^3}W_{kk'\to k''k'''}\left[f_k f_{k'}(1+f_{k''})(1+f_{k'''}) - f_{k''}f_{k'''}(1+f_k)(1+f_{k'})\right] \tag{104}$$

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

$$W_{kk'\to k''k'''} = W_{k''k'''\to kk'} = W_{kk'\to k'''k''}, \qquad W > 0. \tag{105}$$

Lösung: Wir haben

$$Q = k_\mathrm{B}\int \frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\ln\left(\frac{f(\vec{k},\vec{r},t)}{1+f(\vec{k},\vec{r},t)}\right)W_{kk'\to k''k'''}A \tag{106}$$

$$A := \left[f_k f_{k'}(1+f_{k''})(1+f_{k'''}) - f_{k''}f_{k'''}(1+f_k)(1+f_{k'})\right] \tag{107}$$

Wie in der Vorlesung vertauschen wir die Integrationsvariablen. Die folgenden Vertauschungen lassen A unverändert (bzw. geben einen Vorfaktor -1):

$$\begin{aligned} k \leftrightarrow k' : \quad & A = [f_k f_{k'}(1+f_{k''})(1+f_{k'''}) - f_{k''} f_{k'''}(1+f_k)(1+f_{k'})] && (108) \\ & \leftrightarrow [f_{k'} f_k(1+f_{k''})(1+f_{k'''}) - f_{k''} f_{k'''}(1+f_{k'})(1+f_k)] = A && (109) \\ kk' \leftrightarrow k''k''' : \quad & A \to -A && (110) \\ kk' \leftrightarrow k'''k'' : \quad & A \to -A && (111) \end{aligned}$$

Wenn wir all diese Substitutionen im Integral durchführen und die Ergebnisse aufsummieren erhalten wir die folgende Logarithmus-Terme (während der restliche Integrand unverändert bleibt):

$$\begin{aligned} & \ln\left(\frac{f_k}{1+f_k}\right) + \ln\left(\frac{f_{k'}}{1+f_{k'}}\right) - \ln\left(\frac{f_{k''}}{1+f_{k''}}\right) - \ln\left(\frac{f_{k'''}}{1+f_{k'''}}\right) && (112) \\ & = \ln\left(\frac{f_k f_{k'}(1+f_{k''})(1+f_{k'''})}{(1+f_k)(1+f_{k'})f_{k''}f_{k'''}}\right) && (113) \\ & =: B && (114) \end{aligned}$$

W ist immer positiv.

Jetzt können wir wie im Skript eine Fallunterscheidung durchführen:

$$A > 0 \Leftrightarrow f_k f_{k'}(1+f_{k''})(1+f_{k'''}) > f_{k''} f_{k'''}(1+f_k)(1+f_{k'}) \Leftrightarrow B > 0 \tag{115}$$

Analog gilt $B < 0 \Leftrightarrow A < 0$. Also gilt immer $AB \geq 0$ und daher $Q \geq 0$, wobei der Fall $Q = 0$ erreicht wird, wenn das Stoßintegral verschwindet.

(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.

Lösung: Teilchenzahlerhaltung:

$$\int \mathrm{d}^3k\, I[f](\vec{k}) = 0 \tag{116}$$

Analog die Energieerhaltung:

$$\int \mathrm{d}^3k\, \varepsilon(\vec{k}) I[f](\vec{k}) = 0 \tag{117}$$

Wir sehen anhand von Gleichung (103): Diese beiden Bedingungen garantieren $Q = 0$, wenn

$$\ln\left(\frac{f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{1 + f(\vec{k}, \vec{r}, t)}\right) = \varepsilon(\vec{k}) a(\vec{x}) + b(\vec{x}) \tag{118}$$

Wobei $a(\vec{x})$ und $b(\vec{x})$ beliebige ortsabhängige Funktionen sind. Wir finden

$$\frac{f(\vec{k},\vec{r},t)}{1+f(\vec{k},\vec{r},t)} = \exp\Big(\varepsilon(\vec{k})a(\vec{x})+b(\vec{x})\Big) \tag{119}$$

$$\Rightarrow f(\vec{k},\vec{r},t) = \frac{\exp\Big(\varepsilon(\vec{k})a(\vec{x})+b(\vec{x})\Big)}{1-\exp\Big(\varepsilon(\vec{k})a(\vec{x})+b(\vec{x})\Big)} \tag{120}$$

$$= \frac{1}{\exp\Big(-\varepsilon(\vec{k})a(\vec{x})-b(\vec{x})\Big)-1} \tag{121}$$

Mit der Umbenennung $b(\vec{x}) := \mu(\vec{x})\beta(\vec{x})$, $a(\vec{x}) := -\beta(\vec{x})$ finden wir die vertraute Form

$$f(\vec{k},\vec{r},t) = \frac{1}{\exp\Big[\beta(\vec{x})(\varepsilon(\vec{k})-\mu(\vec{x}))\Big]-1}. \tag{122}$$

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