Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) **SS 17**

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Blatt 14
Besprechung: 28.07.2017

---

1. Master-Gleichung: (10+8=18 Punkte)

Ein Kasten A vom Volumen V sei mit einem viel größeren Kasten B durch ein kleines Loch verbunden. Teilchen können das Loch nur einzeln passieren. Die Wahrscheinlichkeit, dass in der Zeit Δt ein Gasteilchen von A nach B geht, sei proportional zu $N\Delta t/V$ (N: Zahl der Teilchen in A), und die Wahrscheinlichkeit von B nach A zu gehen sei proportional zu (gleiche Proportionalitätskonstante) $\rho\Delta t$ (ρ: konstante Teilchendichte in B).

(a) Sei $P(N,t)$ die Wahrscheinlichkeit zur Zeit t gerade N Teilchen in A zu finden. Schreiben Sie die Gleichung für $P(N,t)$ (Master-Gleichung) auf und lösen Sie sie für den stationären Fall.

Lösung:

In einem infinitesimalen Zeitschritt kann nur ein Teilchen diffundieren. Für die Übergangsrate von N auf M Teilchen im Volumen V (Kasten A) erhält man daher

$$W(N,M) = \alpha \frac{N}{V}\,\delta_{N,M+1} + \alpha\,\rho\,\delta_{N,M-1}$$

(Proportionalitätskonstante α).

Die Mastergleichung ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(N,t)}{\partial t} &= \sum_M \Big[\underbrace{W(M,N)P(M,t)}_{\text{“Gewinnterm”}} \underbrace{-W(N,M)P(N,t)}_{\text{“Verlustterm”}}\Big] \\ &= \alpha\,\frac{N+1}{V}P(N+1,t) + \alpha\rho P(N-1,t) - \alpha\left(\frac{N}{V}+\rho\right)P(N,t). \qquad (1)\end{aligned}$$

Hierfür definieren wir sinnvollerweise $P(N=-1,t)=0$.

Stationärer Fall:

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(N,t)}{\partial t} = 0 \quad &\Rightarrow \\ 0 &= \frac{N+1}{V}P(N+1,t) + \rho P(N-1,t) - \left(\frac{N}{V}+\rho\right)P(N,t) \\ &\Longrightarrow (N+1)P(N+1,t) - \rho V P(N,t) = NP(N,t) - \rho V P(N-1,t).\end{aligned}$$

Wir setzen auf der rechten Seite $N=0$ ein, dann folgt induktiv:

$$NP(N,t) - \rho V P(N-1) = 0, \quad \forall N \in \mathbb{N}.$$

Damit ist die Lösung eine Poisson-Verteilung:

$$P(N) \propto \frac{(\rho V)^N}{N!}. \qquad (2)$$

(b) Bestimmen Sie $\langle N(t)\rangle$, indem Sie das erste Moment der Master-Gleichung bilden und die entstehende Differentialgleichung für $\langle N(t=0)\rangle = N_0$ lösen.

Lösung:

Wir multiplizieren die Master-Gleichung (1) mit N und führen die Summation durch:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle N\rangle}{\partial t} &= \sum_{N=0}^{\infty} N \frac{\partial P(N,t)}{\partial t} \\ &= \frac{\alpha}{V}\sum_{N=0}^{\infty} N \left\{[(N+1)P(N+1,t) - NP(N,t)] + \rho V\left[P(N-1,t) - P(N,t)\right]\right\} \\ &= \frac{\alpha}{V}\sum_{N=0}^{\infty} \left\{\left[(N-1)NP(N) - N^2P(N)\right] + \rho V\left[(N+1) - N\right]P(N,t)\right\} \\ &= -\frac{\alpha}{V}\langle N\rangle + \alpha\rho.\end{aligned}$$

Diese Gleichung lässt sich mit dem Ansatz $\langle N(t)\rangle = c(t)e^{\lambda t}$ (Variation der Konstanten) lösen:

$$\langle N(t)\rangle = \rho V + \left[\langle N(0)\rangle - \rho V\right]\exp\left(-\frac{\alpha t}{V}\right). \tag{3}$$

2. Master-Gleichung für Besetzungsinversion: (10 Punkte + 10 Bonuspunkte)

Betrachten Sie ein Dreizustandsatom mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die Wahrscheinlichkeiten das Atom in diesen Zuständen zu finden werden als $p_i(t)$ $(i = 1, 2, 3)$ bezeichnet. Nehmen Sie an, dass ein klassisches elektromagnetisches Feld Übergänge zwischen den Zuständen E_1 and E_3 mit einer Rate Γ antreibt. Desweiteren kann das Niveau E_3 spontan in Zustand E_2 mit einer Rate von γ_{32} zerfallen, während Zustand E_2 mit einer Rate von γ_{21} nach E_1 zerfallen kann.

Bemerkung: Ziel dieser Aufgabe ist es, die Physik des einfachsten Systems zu untersuchen, welches als Laser benutzt werden kann.

(a) Geben Sie die Master-Gleichung für $\{p_i\}$ an. Finden Sie die Gleichgewichtslösungen $p_i(t = \infty)$ der Master-Gleichung. Zeigen Sie, dass das Gleichgewicht bei $\gamma_{21} < \Gamma\gamma_{32}/(\Gamma + \gamma_{32})$ durch eine Besetzungsinversion der atomaren Niveaus charakterisiert wird: $p_2(\infty) > p_1(\infty)$. Untersuchen Sie die Gleichgewichtslösungen im Grenzfall $\gamma_{21} \ll \gamma_{32} \ll \Gamma$.

Lösung:

Wir beginnen mit der allgemeinen Master-Gleichung

$$\dot{p}_i = \sum_k \gamma_{ki}p_k - \gamma_{ik}p_i. \tag{4}$$

Wir betrachten alle in der Aufgabe beschriebenen Übergänge und finden folgende Master-Gleichung

$$\begin{aligned}\dot{p}_1 &= \gamma_{21}p_2 + \Gamma p_3 - \Gamma p_1 &(5)\\ \dot{p}_2 &= \gamma_{32}p_3 - \gamma_{21}p_2 &(6)\\ \dot{p}_3 &= \Gamma p_1 - \Gamma p_3 - \gamma_{32}p_3. &(7)\end{aligned}$$

Nun suchen wir die Gleichgewichtslösungen der Master-Gleichung.

Dazu müssen p_1, p_2 und p_3 die rechte Seite der Gleichung annullieren und die Normierungsbedingung $p_1 + p_2 + p_3 = 1$ erfüllen. Wir finden

$$p_1(\infty) = \frac{\gamma_{21}(\gamma_{32} + \Gamma)}{\gamma_{21}(\gamma_{32} + 2\Gamma) + \gamma_{32}\Gamma}, \tag{8}$$

$$p_2(\infty) = \frac{\gamma_{32}\Gamma}{\gamma_{21}(\gamma_{32} + 2\Gamma) + \gamma_{32}\Gamma}, \tag{9}$$

$$p_3(\infty) = \frac{\gamma_{21}\Gamma}{\gamma_{21}(\gamma_{32} + 2\Gamma) + \gamma_{32}\Gamma}. \tag{10}$$

Die Differenz $p_2(\infty) - p_1(\infty)$ lautet insbesondere

$$p_2(\infty) - p_1(\infty) = \frac{\gamma_{32}\Gamma - \gamma_{21}(\gamma_{32} + \Gamma)}{\gamma_{32}\Gamma + \gamma_{21}(\gamma_{32} + 2\Gamma)} \tag{11}$$

Für $\gamma_{21} < \gamma_{32}\Gamma/(\gamma_{32} + \Gamma)$ ist $p_2(\infty) - p_1(\infty) > 0$. Das System erreicht also Besetzungsinversion in diesem Regime.

Unsere Ergebnisse sind insbondere transparent im Limes von sehr starkem Antrieb und vernachlässigbarer Relaxation $E_2 \to E_1$. Wir erhalten

$$p_3(\infty) = p_1(\infty) = 0 \qquad p_2(\infty) = 1. \tag{12}$$

(b) Betrachten Sie nun N unabhängige Drei-Niveau-Systeme in einem Hohlraum (elektromagnetischer Resonator), der eine resonante elektromagnetische Mode mit Frequenz $\omega = E_2 - E_1$ aufweist. Die Photonen im Hohlraum können von den Atomen absorbiert werden (einhergehend mit Übergang $E_1 \to E_2$) und auch einen stimulierten Übergang $E_2 \to E_1$ hervorrufen. Die Übergangsraten für diese Übergänge sind identisch und proportional zur Anzahl der Photonen im Hohlraum, $\gamma_{12} = gn$. Zur Vereinfachung vernachlässigen wir von nun an spontane Übergänge $E_2 \to E_1$. Die Master-Gleichung wird dann durch

$$\begin{aligned}
\dot{p}_1 &= gnp_2 + \Gamma p_3 - gnp_1 - \Gamma p_1 \qquad (13)\\
\dot{p}_2 &= gnp_1 + \gamma_{32}p_3 - gnp_2 \qquad (14)\\
\dot{p}_3 &= \Gamma p_1 - \Gamma p_3 - \gamma_{32}p_3 \qquad (15)
\end{aligned}$$

ausgedrückt. Diese Master-Gleichung sollte durch die Gleichung für die Anzahl der Photonen im Hohlraum ergänzt werden. Da alle Übergänge $E_2 \to E_1$ n um 1 erhöhen und Übergänge $E_1 \to E_2$ n um 1 verringern, erhalten wir

$$\dot{n} = gnN(p_2 - p_1) - \kappa n. \tag{16}$$

Der letzte Term in Gleichung (16) beschriebt einen Abfluss von Photonen aus dem Hohlraum in die Außenwelt.

Die Lösungen der Gleichugnen (13), (14), (15) und (16) werden sich dem Gleichgewichtszustand, der durch $p_i(\infty)$ und $n(\infty)$ charakterisiert ist, annähern. Drücken Sie $p_i(\infty)$ durch $n(\infty)$ und Übergangsraten aus. Finden Sie $n(\infty)$ und $p_i(\infty)$ im Limes $\Gamma \to \infty$.

Lösung:

Für den Gleichgewichtszustand ist die rechte Seite der Master-Gleichung jeweils null. Mit Gln. (13), (14), (15) und der Normierungsbedingung für die Wahrscheinlichkeiten finden wir

$$p_1(\infty) = \frac{gn(\infty)(\gamma_{32}+\Gamma)}{\gamma_{32}\Gamma + gn(\infty)(2\gamma_{32}+3\Gamma)}, \tag{17}$$

$$p_2(\infty) = \frac{\gamma_{32}\Gamma + gn(\infty)(\gamma_{32}+\Gamma)}{\gamma_{32}\Gamma + gn(\infty)(2\gamma_{32}+3\Gamma)}, \tag{18}$$

$$p_3(\infty) = \frac{gn(\infty)\Gamma}{\gamma_{32}\Gamma + gn(\infty)(2\gamma_{32}+3\Gamma)}. \tag{19}$$

Im Grenzfall $\Gamma \to \infty$ erhalten wir

$$p_1(\infty) = p_3(\infty) = \frac{gn(\infty)}{3gn(\infty)+\gamma_{32}}, \tag{20}$$

$$p_2(\infty) = \frac{gn(\infty)+\gamma_{32}}{3gn(\infty)+\gamma_{32}}. \tag{21}$$

$$\tag{22}$$

Wie in Aufgabe 2a ist das System auch in diesem Regime durch Besetzungsinversion charakterisiert mit

$$p_2(\infty) - p_1(\infty) = \frac{\gamma_{32}}{3gn+\gamma_{32}}. \tag{23}$$

Nun benutzten wir Gl. (16) um den Gleichgewichtszustand des Gesamtsystems zu finden. Die Bedingung für einen Gleichgewichtszustand lauten

$$n(\infty)\left[\frac{gN\gamma_{32}}{3gn(\infty)+\gamma_{32}} - \kappa\right] = 0. \tag{24}$$

Für $\kappa > gN$ ist die einzige mögliche Lösung dieser Gleichung

$$n(\infty) = 0. \tag{25}$$

Die dazugehörige Bestetzungen sind (s. Aufgabe 2a)

$$p_3(\infty) = p_1(\infty) = 0 \qquad p_2(\infty) = 1. \tag{26}$$

Für $\kappa < gN$ kann gezeigt werden, dass die Lösung $n(\infty) = 0$ instabil ist. Aber es gibt noch eine weitere Lösung

$$n(\infty) = \frac{(gN-\kappa)\gamma_{32}}{3g\kappa}. \tag{27}$$

In diesem Zustand emittiert der Resonator koherentes Licht mit der Frequenz ω und kann als Laser dienen. Die Emissionsrate des Lasers ist $\kappa n(\infty)$ Photonen pro Sekunde. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Atome über die Niveaus in diesem Regime lautet

$$p_1(\infty) = p_3(\infty) = \frac{1}{3} - \frac{\kappa}{3gN}, \tag{28}$$

$$p_2(\infty) = \frac{1}{3} + \frac{2\kappa}{3gN}. \tag{29}$$

$$\tag{30}$$

3. Verzögerte Dämpfung: (5+8+15+4=32 Bonuspunkte)

Betrachten Sie das Modell der Quanten-Dissipation mit der Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x}(t) + m\int_0^t ds\; K(t-s)\dot{x}(s) = F(t), \tag{31}$$

wobei $F(t)$ eine gegebene Kraft ist. Hier wird die Dämpfung durch einen Dämpfungskern beschrieben:

$$K(t) = \Theta(t)\gamma_0\omega_d e^{-\omega_d t}, \tag{32}$$

wobei $\Theta(t)$ die Heaviside-Funktion ist. Die Anfangsbedingungen sind $x(0) = x_0$ und $\dot{x}(0) = v_0$.

(a) Finden Sie $x(t)$ im Limes $\omega_d \to \infty$.

Lösung:

Im Limes $\omega_d \to \infty$ erhält man die Langewin-Gleichung,

$$\int_0^t ds\; \omega_d e^{-\omega_d(t-s)}\dot{x}(s) \to \dot{x}(t)\int_0^t ds\; \omega_d e^{-\omega_d(t-s)} \to \dot{x}(t) \quad \Longrightarrow$$

$$m\ddot{x}(t) + m\gamma_0\dot{x}(t) = F(t) \quad \Leftrightarrow \quad m\dot{v}(t) + m\gamma_0 v(t) = F(t),$$

die einfach integriert werden kann:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma_0 t} + e^{-\gamma_0 t}\int_0^t dt' \frac{F(t')}{m} e^{\gamma_0 t'}, \tag{33}$$

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \int_0^t dt' v(t') \\ &= x_0 + \frac{v_0}{\gamma_0}\left(1 - e^{-\gamma_0 t}\right) - \frac{1}{\gamma_0}e^{-\gamma_0 t}\int_0^t dt' \frac{F(t')}{m}e^{+\gamma_0 t'} + \frac{1}{\gamma_0}\int_0^t dt' \frac{F(t')}{m}. \end{aligned} \tag{34}$$

(b) Die Bewegungsgleichung (31) kann allgemein mit der Laplace-Transformation gelöst werden. Drücken Sie die Gleichung für die Laplace-Transformation von $x(t)$,

$$\tilde{x}(z) = \int_0^\infty dt\; x(t)e^{-zt},$$

aus.

Lösung:

Laplace-Transformation der Ableitung:

$$\widetilde{\dot{x}}(z) = \int_0^\infty dt\; \dot{x}(t)e^{-zt} \overset{\text{part. Int.}}{=} \underbrace{x(t)e^{-zt}\Big|_0^\infty}_{-x(0)} + z\underbrace{\int_0^\infty dt\; x(t)e^{-zt}}_{\tilde{x}(z)} = z\tilde{x}(z) - x_0,$$

iterativ: $\widetilde{\ddot{x}}(z) = z\widetilde{\dot{x}}(z) - \dot{x}(0) = z^2\tilde{x}(z) - zx_0 - v_0.$

Die Laplace-Transformierte $\mathcal{L}$ der Faltung zweier Funktionen ist das Produkt der Laplace-Transformierten:

$$\left\{\mathcal{L}\int_0^t ds\; f(t-s)g(s)\right\}(z) = (\mathcal{L}f)(z)(\mathcal{L}g)(z) = \tilde{f}(z)\tilde{g}(z),$$

wie man sich mit folgendem Trick (Substituion und Multiplikation mit einer eins) klarmachen kann:

$$\int_0^\infty dt \int_0^t ds\ f(t-s)g(s)e^{zt}$$

$$\underbrace{=}_{\text{Subst.: } t\to t+s'} \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds' \int_0^{t+s'} ds\ f(t+s'-s)g(s)e^{-z(t+s')}\delta(s-s')$$

$$= \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds'\ f(t)g(s')e^{-zt}e^{-zs'} = \tilde{f}(z)\tilde{g}(z).$$

Damit erhalten wir dann aus der Bewegungsgleichung (31):

$$\left[mz + m\tilde{K}(z)\right][z\tilde{x}(z) - x_0] - mv_0 = \tilde{F}(z),$$

aufgelöst nach $\tilde{x}(z)$:

$$\tilde{x}(z) = \underbrace{\frac{\tilde{F}(z)}{zm[z+\tilde{K}(z)]}}_{=\tilde{x}_0(z)} + \frac{x_0}{z} + \frac{v_0}{z[z+\tilde{K}(z)]}. \tag{35}$$

(c) Die Suszeptibilität $\tilde{\chi}(z)$ wird durch die Relation

$$\tilde{x}_0(z) = \tilde{\chi}(z)\tilde{F}(z),$$

definiert, wobei $\tilde{x}_0(z)$ der Teil von $\tilde{x}(z)$ unabhängig von den Anfangsbedingungen ist. Zeigen Sie, dass

$$\tilde{\chi}(z) = \frac{1}{m}\frac{z+\omega_d}{z(z^2+z\omega_d+\gamma_0\omega_d)}.$$

Finden Sie die inverse Laplace-Transformation der Suszeptibilität

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\tilde{\chi}(z), \qquad t>0, \quad c>0,$$

unter Verwendung der Konturintegration.

Lösung:

Mit

$$\tilde{K}(z) = \int_0^\infty dt\ \Theta(t)\gamma_0\omega_d e^{-\omega_d t}e^{-zt} = -\frac{\gamma_0\omega_d}{\omega_d+z}e^{-(\omega_d+z)t}\Big|_0^\infty = \frac{\gamma_0\,\omega_d}{\omega_d+z}$$

ist die Suzeptibilität $\tilde{\chi}(x) = \tilde{x}_0(z)/\tilde{F}(z)$ durch

$$\tilde{\chi}(z) = \frac{1}{z(mz+m\frac{\gamma_0\,\omega_d}{\omega_d+z})} = \frac{\omega_d+z}{z\left[mz(\omega_d+z)+m\gamma_0\,\omega_d\right]} = \frac{1}{m}\frac{z+\omega_d}{z(z^2+z\omega_d+\gamma_0\omega_d)} \tag{36}$$

gegeben.

Inverse Laplace-Transformation der Suszeptibilität:

$$\chi(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\tilde{\chi}(z) = \frac{1}{2\pi i m}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\frac{z+\omega_d}{z(z^2+z\omega_d+\gamma_0\omega_d)}$$

$$= \frac{1}{2\pi i m}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\frac{z+\omega_d}{z\left[z-\left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)\right]\left[z-\left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)\right]}$$

$$\text{mit } \Delta = \frac{\sqrt{\omega_d^2-4\gamma_0\omega_d}}{2} < \frac{\omega_d}{2} \qquad (\gamma_0>0).$$

Nun lässt sich die Integrationskontur in der linken Hälfte der komplexen z-Ebene schließen. Mit dem Residuensatz folgt dann:

$$\begin{aligned}
m\chi(t) &= \frac{1}{\gamma_0} + e^{\left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)t} \frac{\omega_d + \left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)}{\left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)\left[\left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right) - \left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)\right]} \\
&\quad + e^{\left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)t} \frac{\omega_d + \left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)}{\left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)\left[\left(-\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right) - \left(-\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)\right]} \\
\chi(t) &= \frac{1}{m\gamma_0} + \frac{1}{2m\Delta}\left[-\frac{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)}e^{\Delta t} + \frac{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)}e^{-\Delta t}\right] e^{-\frac{\omega_d t}{2}}.
\end{aligned}$$

Für $t \to \infty$ klingt der zweite Term in der geschweiften Klammer mit $\exp\left[\left(-\omega_d/2 \pm \Delta\right)t\right]$ ab, so dass

$$\chi(t) \to \frac{1}{m\gamma_0}, \quad t \to \infty. \tag{37}$$

(d) Betrachten wir nun eine konstante Kraft $F(t) = F_0$ für $t > 0$. Finden Sie das Verhalten von $x(t)$ in der Langzeitgrenze $t \to \infty$.

Lösung:

$$x(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\tilde{x}(z) = \int_0^t ds\chi(s)F(t-s) + X_0(t). \tag{38}$$

Der Term $X_0(t)$ ist von den Anfangsbedingungen abhängig.
Konstante Kraft: $F(t) = F_0$ für $t > 0 \implies$

$$\int_0^t ds\chi(s)F(t-s) = F_0\int_0^t ds\chi(s), \tag{39}$$

wobei

$$\begin{aligned}
F_0\int_0^t ds\chi(s) = \underbrace{\frac{F_0}{m\gamma_0}}_{\text{linear}}t + \underbrace{\frac{1}{2\Delta}e^{-\frac{\omega_d t}{2}}\left[\frac{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)^2}e^{\Delta t} - \frac{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)^2}e^{-\Delta t}\right]}_{\text{fällt exponentiell ab für } t\to\infty} \\
\underbrace{-\frac{1}{2\Delta}\left[\frac{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)^2} - \frac{\left(\frac{\omega_d}{2}-\Delta\right)}{\left(\frac{\omega_d}{2}+\Delta\right)^2}\right]}_{\text{konstant}}.
\end{aligned}$$

Für große t dominiert der lineare Term (gleichförmige Bewegung). Die externe Kraft F_0 und die Dämpfung sind also im Gleichgewicht.
Der Term $X_0(t)$ lautet

$$\begin{aligned}
X_0(t) &= \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{zt}\left\{\frac{x_0}{z} + \frac{v_0}{z[z+\tilde{K}(z)]}\right\} \\
&= x_0 + mv_0\chi(t)
\end{aligned} \tag{40}$$

Für große t gilt Gl. (37) für die Suszeptibilität, somit ist der Beitrag von $X_0(t)$ konstant für $t \to \infty$.