Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Maximilian Schmitt (Sprechstunde: Mo 14:00-15:00 in EW 708)

11. Übungsblatt – Statistische Physik des Nichtgleichgewichts

Abgabe/Vorrechnen: Mi. 02.07.2014 zu Beginn der Übung

M **Aufgabe 34**: *Charakteristische Funktion*

Die Fouriertransformierte einer Verteilung $P(x)$ (bzw. den Erwartungswert $\langle e^{-ikx}\rangle$) nennt man charakteristische Funktion:

$$G(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} P(x) \ .$$

(a) Zeigen Sie, dass

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{(-i)^n} \left. \frac{d^n G(k)}{dk^n} \right|_{k=0} \ ,$$

und erläutern Sie, dass bei Kenntnis aller $\langle x^n\rangle$, die Verteilung $P(x)$ eindeutig bestimmt ist.

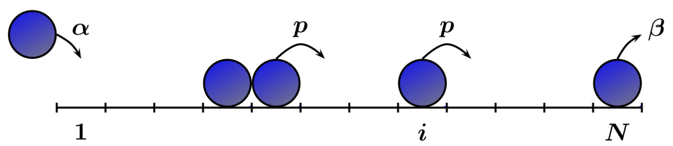
(b) Berechnen Sie $G(k)$ für die Exponentialverteilung:

$$P_\lambda(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & x \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \ ,$$

und berechnen Sie damit $\langle x \rangle$.

M **Aufgabe 35**: *TASEP: Mastergleichung und Korrelationen*

Der *Totally Asymmetric Simple Exclusion Process* (TASEP) ist eine einfache Realisierung eines



offenen getriebenen Nicht-Gleichgewicht-Systems und ein Beispiel eines Markov-Prozesses. Das System besteht aus einem 1D Gitter, mit N Gitterplätzen. Auf jedem Gitterplatz i kann entweder ein Teilchen $n_i = 1$ oder kein Teilchen $n_i = 0$ sitzen. Teilchen springen mit der Wahrscheinlichkeit $0 \leq p \leq 1$ von Platz i zum nächsten Gitterplatz $i+1$, es sei denn $i+1$ ist bereits belegt. Am linken Rand bei $i = 1$ werden Teilchen dem System mit der Rate $0 \leq \alpha \leq 1$ hinzugefügt (es sei denn der Platz ist belegt) und am rechten Rand verlassen Teilchen das Gitter mit der Rate $0 \leq \beta \leq 1$.

Die Mastergleichung für die mittlere Dichte am Platz $1 < i < N$ lautet:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n_i\rangle}{dt} &= \langle p\, n_{i-1}(1-n_i) - p\, n_i(1-n_{i+1})\rangle \ , \\ &= p\left(\langle n_{i-1}\rangle - \langle n_{i-1}n_i\rangle - \langle n_i\rangle + \langle n_i n_{i+1}\rangle\right) \ . \end{aligned}$$

(a) Wie lautet die Mastergleichung für $\langle n_1\rangle$ bzw. $\langle n_N\rangle$?

(b) Wie lautet die Mastergleichung für $\langle n_i n_{i+1}\rangle$?

S **Aufgabe 36 (10 Punkte):** *TASEP - Phasendiagramm in der Molekularfeldnäherung*
Im Folgenden soll die *Molekularfeldnäherung* $\langle n_i n_j \rangle = \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle \equiv \rho_i \rho_j$ verwendet werden. Ferner gilt $p = 1$.

(a) Identifizieren Sie damit den Teilchenstrom $J_{i,i+1}$, der durch das Gitter von i nach $i+1$ fließt und den Teilchenstrom $J_{i-1,i}$, der von $i-1$ nach i fließt. Zeigen Sie, dass im stationären Fall der Teilchenstrom nicht vom Gitterplatz abhängt: $J_{i,i+1} \to J$.

Im Folgenden soll weiter der stationäre Fall betrachtet werden.

(b) Finden Sie eine Rekursionsformel für ρ_{i+1} als Funktion von ρ_i und bestimmen Sie deren Fixpunkte ρ_- und ρ_+ (mit $\rho_- < \rho_+$) sowie deren Stabilität. Zeigen Sie, dass $\rho_- + \rho_+ = 1$. Fertigen Sie eine Skizze von der Rekursionsformel an (ρ_{i+1} über ρ_i). Welchen Einfluss hat J auf die Fixpunkte?

(c) Zeigen Sie mit Hilfe von Aufgabe 35 (a), dass $\rho_1 = \alpha$ und $\rho_N = 1 - \beta$. Nehmen Sie dazu an, dass $\rho_1 \approx \rho_2$ und $\rho_N \approx \rho_{N-1}$.

(d) Zeigen Sie, dass der TASEP drei Phasen besitzt:

(i) Eine Niedrigdichtephase mit $J_{ND} = (1-\alpha)\alpha$,

(ii) Eine Hochdichtephase mit $J_{HD} = (1-\beta)\beta$,

(iii) Eine Phase maximalen Stroms mit $J_{MAX} = 1/4$.

Hinweis: Verwenden die Beziehungen $\rho_+ > \rho_-$ und $\rho_- + \rho_+ = 1$.
Fertigen Sie ein Phasendiagramm im α, β Phasenraum an und zeichnen Sie die Phasengrenzen zwischen den drei Phasen. Welche Phasenübergänge gibt es in dem System?

S **Aufgabe 37 (10 Punkte):** *Alternativ: TASEP - Monte-Carlo Simulation*
Simulieren Sie den TASEP am Computer (z.B. mit C). Verwenden Sie folgende Monte Carlo Methode mit sequentiellem Zeitupdate:

Gegeben sei ein Gitter mit N Gitterplätzen und den Raten α und β. (Es gilt weiterhin $p = 1$)
Wähle zufällig ein $i \in [0, N]$.

1. Fall $i = 0$: Ist $\rho_1 = 1$, so breche ab. Sonst ziehe eine Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und vergleiche sie mit α. Ist $r < \alpha$, so füge ein Teilchen bei $i = 1$ hinzu. Sonst breche ab.
2. Fall $i = N$: Ist $\rho_N = 0$, so breche ab. Sonst ziehe eine Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und vergleiche sie mit β. Ist $r < \beta$, so entferne ein Teilchen bei $i = N$. Sonst breche ab.
3. Fall $0 < i < N$: Ist $\rho_i = 1$ und $\rho_{i+1} = 0$, so führe einen Sprungprozess aus. Sonst breche ab.

Wiederhole dieses N mal. Das ist dann ein Monte Carlo Zeitschritt.

Verwenden Sie $N = 100$ und als Anfangbedingung eine zufällige Belegung des Gitters und simulieren Sie die Fälle

(i) $\alpha = 0.2, \beta = 0.8$, (ii) $\alpha = 0.8, \beta = 0.2$, (iii) $\alpha = 0.8, \beta = 0.8$, (iv) $\alpha = 0.2, \beta = 0.2$.

Messen Sie die stationäre mittlere Dichte im Gitter und plotten Sie das Dichteprofil (gemittelt über die Zeit) für die vier Fälle. Geben Sie den Quellcode mit ab.