**Moderne Theoretische Physik IIIb (Theorie Fb)** **Sommersemester 2019**

**Prof. Dr. Alexander Mirlin**
**PD Dr. Igor Gornyi, Dr. Stefan Rex**

**Lösungen 1. Klausur, 24.06.2019**
**Bewertungsgrundlage**

---

**1. Dimerisierung im 1D-Ising-Modell:** $(20 + 20 = 40$ Punkte$)$

Betrachten Sie ein eindimensionales Ising-Modell für $2N$ Spins ($S = 1/2$) auf einem Ring ($s^z_{2N+1} = s^z_1$) mit einer "Dimerisierung" der Kette, d.h. die Bindungen werden alternierend geschwächt und gestärkt:

$$H = -J\left[(1-\phi)\sum_{i=1}^{N} s^z_{2i-1}s^z_{2i} + (1+\phi)\sum_{i=1}^{N} s^z_{2i}s^z_{2i+1}\right].$$

Dabei ist $\phi$ ein fester Parameter mit $0 \le \phi \le 1$.

(a) Führen Sie die Transfermatrixmethode aus, um die kanonische Zustandssumme $Z$ des Modells auszudrücken. Berechnen Sie die Entropie der Kette im Limes $N \to \infty$.

(b) Bestimmen Sie mithilfe der Transfermatrixmethode für $N \to \infty$ die Korrelationsfunktion $\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle - \langle\sigma_i\rangle^2$ und die Korrelationslänge $\xi$. Dabei sei $i$ ungerade, $n$ gerade und $n \ll N$.

(c) **10 Bonuspunkte:**
Nun sei $\phi$ nicht mehr fest, sondern soll als zusätzlicher Freiheitsgrad betrachtet werden. Dafür muss $H$ um die Dimerisierungsenergie ergänzt werden: $H \to H + H_\phi$ mit $H_\phi = 2N\Omega\phi^2$, wobei $\Omega > 0$ die Energiekosten der Dimerisierung darstellt.
Leiten Sie, ausgehend von $Z$, das Freie-Energiedichte-Funktional in der Form

$$f(\phi) = f_N + \frac{t}{2}\phi^2 + b\phi^4$$

für $\phi \ll 1$ her und bestimmen Sie $f_N$, $t$ und $b$.
*Hinweis:*

$$\cosh(x) = 1 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{24}x^4 + \mathcal{O}(x^6),$$
$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^3).$$

**Lösung:**

(a) Für die Spins im Ising-Modell gilt $s^z_i \in \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}$. **(1 P)**
Damit haben wir die Zustandssumme:

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) = \sum_{s^z_1=\pm\frac{1}{2}} \cdots \sum_{s^z_{2N}=\pm\frac{1}{2}} e^{-\beta H(\{s^z_i\})} \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$= \sum_{s^z_1=\pm\frac{1}{2}} \cdots \sum_{s^z_{2N}=\pm\frac{1}{2}} e^{\beta J(1-\phi)s^z_1 s^z_2}\, e^{\beta J(1+\phi)s^z_2 s^z_3} \cdots e^{\beta J(1-\phi)s^z_{2N-1}s^z_{2N}}\, e^{\beta J(1+\phi)s^z_{2N}s^z_1} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Nun führen wir die Transfermatrizen $\mathcal{T}_\pm$ ein:

$$\mathcal{T}_\pm = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\beta J(1\pm\phi)}{4}\right) & \exp\left(-\frac{\beta J(1\pm\phi)}{4}\right) \\ \exp\left(-\frac{\beta J(1\pm\phi)}{4}\right) & \exp\left(\frac{\beta J(1\pm\phi)}{4}\right) \end{pmatrix} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Damit hat die Zustandssumme die Form

$$Z = \sum_{\{s_i^z\}} \left[(\mathcal{T}_-)_{s_1^z s_2^z}(\mathcal{T}_+)_{s_2^z s_3^z}\right]\left[(\mathcal{T}_-)_{s_3^z s_4^z}(\mathcal{T}_+)_{s_4^z s_5^z}\right]\dots\,, \qquad \textbf{(2 P)}$$

also mit

$$\mathcal{T} := \mathcal{T}_- \cdot \mathcal{T}_+ = 2\begin{pmatrix} \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) & \cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right) \\ \cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right) & \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \end{pmatrix} \qquad \textbf{(2 P)}$$

und unter Ausnutzung der zyklischen Randbedingung:

$$Z = \mathrm{tr}\left[\mathcal{T}^N\right] \qquad \textbf{(1 P)}$$

Diese Spur berechnen wir durch Diagonalisierung von $\mathcal{T}$:

$$\det\left(\mathcal{T} - \lambda \mathbb{1}\right) = 0$$

liefert die Eigenwerte

$$\lambda_{1,2} = 2\left[\cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \pm \cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)\right] \qquad \textbf{(2 P)}$$

Für $N \to \infty$ dominiert der größere Eigenwert ($\lambda_1^N \gg \lambda_2^N$), somit **(1 P)**

$$Z = \mathrm{Tr}\left[\mathcal{T}^N\right] = \lambda_1^N + \lambda_2^N \overset{N\to\infty}{\longrightarrow} 2^N\left[\cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)\right]^N . \qquad \textbf{(2 P)}$$

Freie Energie: $F = -Nk_BT\ln\lambda_1$ **(1 P)**

Entropie:

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_N \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$= Nk_B\ln\lambda_1 - \frac{NJ}{T}\frac{1}{\lambda_1}\left[\sinh\left(\frac{\beta J}{2}\right) + \phi\sinh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)\right] \qquad \textbf{(2 P)}$$

(b) Um die Korrelatoren zu berechnen, schreiben wir die Zustandssumme wieder in Transfermatrizen und nutzen dann den Trick aus der Vorlesung, um den Korrelator als Matrixprodukt zu schreiben:

$$\sigma_i = (\sigma_z)_{\sigma_i\sigma_i} \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$\Rightarrow \mathcal{T}_{\sigma_1\sigma_2}\mathcal{T}_{\sigma_2\sigma_3}\sigma_2 = \sum_k \mathcal{T}_{\sigma_1\sigma_2}(\sigma_z)_{\sigma_2 k}\mathcal{T}_{k\sigma_3} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Die Elemente, die wir durch die Summe über $k$ hinzufügen, sind gleich Null, da die Paulimatrix diagonal ist.

Betrachten wir zunächst $\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle$. Es ist $i$ ungerade und $n$ gerade, so dass wir wieder alle $\mathcal{T}_+$ und $\mathcal{T}_-$ zu $\mathcal{T}$s zusammenfassen können:

$$Z\cdot\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle = \mathrm{tr}\left(\mathcal{T}^{\frac{i-1}{2}}\sigma_z\mathcal{T}^{\frac{n}{2}}\sigma_z\mathcal{T}^{\frac{2N-n-i+1}{2}}\right) \qquad \textbf{(2 P)}$$

Die Berechnung der Spur führen wir wie in der Vorlesung in den Eigenvektoren von $\mathcal{T}$ durch. Diese lauten

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \qquad \textbf{(1 P)}$$
$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \qquad \textbf{(1 P)}$$

und es gilt

$$\begin{aligned}Z\cdot\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle &= \sum_{l,l',l''}\langle l|\,\mathcal{T}^{\frac{i-1}{2}}\sigma_z\,|l'\rangle\,\langle l'|\,\mathcal{T}^{\frac{n}{2}}\,|l''\rangle\,\langle l''|\,\sigma_z\mathcal{T}^{\frac{2N-n-i+1}{2}}\,|l\rangle \\ &= \sum_l \lambda_l^{\frac{i-1}{2}}\lambda_l^{\frac{2N-n-i+1}{2}}\sum_{l'}\lambda_{l'}^{\frac{n}{2}}\left|\langle l'|\,\sigma_z\,|l\rangle\right|^2 \qquad \textbf{(3 P)}\end{aligned}$$

Für $2N\gg n$ haben wir dann, den größeren Eigenwert mit $\lambda_+$ und den kleineren mit $\lambda_-$ bezeichnend und mit $\langle l|\,\sigma_z\,|l'\rangle$ eingesetzt

$$Z\cdot\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle = \lambda_+^{\frac{2N-n}{2}}\lambda_-^{\frac{n}{2}} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Und mit $Z=\lambda_+^N$

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^{\frac{n}{2}} = \left(\frac{\cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right)-\cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right)+\cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)}\right)^{\frac{n}{2}} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Eine analoge Rechnung zeigt, dass $\langle\sigma_i\rangle$ verschwindet, **(3 P)**
also $\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle-\langle\sigma_i\rangle^2=\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle$ Jetzt können wir wie in der Vorlesung die Korrelationslänge $\xi$ definieren:

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle \sim \exp\left(-\frac{n}{\xi}\right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

Damit können wir ablesen

$$\begin{aligned}\xi &= 2\left(\log\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\right)\right)^{-1} = 2\left(\log\left(\frac{\cosh\left(\left(\frac{\beta J}{2}\right)+\cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)\right)}{\cosh\left(\left(\frac{\beta J}{2}\right)-\cosh\left(\frac{\beta J\phi}{2}\right)\right)}\right)\right)^{-1} \\ &= \frac{2}{\log\left[\coth\left(\frac{J(1+\phi)}{4k_\mathrm{B}T}\right)\coth\left(\frac{J(1-\phi)}{4k_\mathrm{B}T}\right)\right]} \qquad \textbf{(2 P)}\end{aligned}$$

Für $\phi=0$ ergibt sich gerade das bekannte Resultat aus der Vorlesung für die gewöhnliche Ising-Kette. Für $\phi=1$ verschwindet die Korrelationslänge. Dann ist die Kette vollständig dimerisiert und nur noch die Paare $(2,3),(4,5),\dots,(2N,1)$ nächster Nachbarn sind korreliert.

(c) Bezeichnen wir die Zustandssumme aus der vorherigen Aufgabe mit $Z_{\text{spin}}$. Dann haben wir für die neue Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z(T,N) &= \int_0^1 \mathrm{d}\phi \exp\left(-\beta H_\phi\right) \exp\left(\log\left(Z_{\text{spin}}\right)\right) \\ &= \int_0^1 \mathrm{d}\phi \exp\left(-\beta\left(H_\phi + F(T,N,\phi)\right)\right) \end{aligned} \qquad \textbf{(1 P)}$$

$H_\phi$ ist schon von quadratischer Ordnung in $\phi$. Also müssen wir nur noch $F(T,N,\phi)$ bis zur vierten Ordnung in $\phi$ entwickeln, um $f(\phi)$ zu erhalten.

$$F(T,N,\phi) = -\frac{N}{\beta}\log\left(2\left(\cosh\left(\frac{J\beta}{2}\right) + \cosh\left(\frac{J\beta\phi}{2}\right)\right)\right) \qquad \textbf{(2 P)}$$

Zunächst:

$$\cosh(\alpha x) = 1 + \frac{\alpha^2}{2}x^2 + \frac{\alpha^4}{24}x^4 + \mathcal{O}(x^6)$$

Mit $\alpha := \frac{J\beta}{2}$

$$\begin{aligned} F(T,N,\phi) &= -\frac{N}{\beta}\log\left(2\left(\cosh(\alpha) + 1 + \frac{\alpha^2}{2}\phi^2 + \frac{\alpha^4}{24}\phi^4 + \mathcal{O}(\phi^6)\right)\right) \\ &=: -\frac{N}{\beta}\log(\gamma + x) = -\frac{1}{\beta}\left(\log(\gamma) + \log\left(1 + \frac{x}{\gamma}\right)\right) \end{aligned} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Wobei

$$\begin{aligned} \gamma &:= 2\cdot(\cosh(\alpha) + 1) \\ x &:= \alpha^2\phi^2 + \frac{\alpha^4}{12}\phi^4 + \mathcal{O}(\phi^6) \end{aligned}$$

Es gilt

$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^3)$$

Alles eingesetzt:

$$\begin{aligned} F(T,N,\phi) &= -\frac{N}{\beta}\left(\log(2(\cosh(\alpha)+1)) + \frac{\alpha^2\phi^2 + \frac{\alpha^4}{12}\phi^4}{2(\cosh(\alpha)+1)} - \frac{\alpha^4\phi^4}{8(\cosh(\alpha)+1)^2}\right) \\ &= -\frac{N}{\beta}\left(\log(2(\cosh(\alpha)+1)) + \phi^2\frac{\alpha^2}{2(\cosh(\alpha)+1)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\phi^4\alpha^4}{4}\left(\frac{1}{6(\cosh(\alpha)+1)} - \frac{1}{2(\cosh(\alpha)+1)^2}\right)\right) \end{aligned} \qquad \textbf{(2 P)}$$

Zusammen mit dem Faktor aus $H_\phi$ lesen wir ab

$$f_N = -\frac{N}{\beta}\log(2(\cosh\left(\frac{J\beta}{2}\right) + 1)) \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$\frac{t}{2} = 2N\Omega - \frac{NJ^2\beta}{8(\cosh\left(\frac{J\beta}{2}\right) + 1)} \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$b = -N\frac{J^4\beta^3}{128}\left(\frac{1}{3(\cosh\left(\frac{J\beta}{2}\right)+1)} - \frac{1}{(\cosh\left(\frac{J\beta}{2}\right)+1)^2}\right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

**2. Gekoppelte Ordnungsparameter:** $(14 + 16 = 30$ Punkte)

Das Freie-Energiedichte-Funktional für ein System mit zwei gekoppelten magnetischen Ordnungsparametern $\phi_1$ und $\phi_2$ im Magnetfeld lautet:

$$f(\phi_1, \phi_2) = a\,(T - T_0)\left(\phi_1^2 + \phi_2^2\right) + b\,\left(\phi_1^4 + \phi_2^4\right) + \frac{g}{2}\,(\phi_1 + \phi_2)^2 - h\,(\phi_1 + \phi_2)\,,$$

wobei $T_0, a, b, g > 0$.

(a) Berechnen Sie die Suszeptibilität $\chi_1(T) = \lim\limits_{h\to 0} \dfrac{\partial \phi_1}{\partial h}$ im thermischen Gleichgewicht in der ungeordneten Phase.
*Hinweis: Es ist nützlich, zunächst zu neuen Variablen $\phi_\pm = \frac{1}{2}(\phi_1 \pm \phi_2)$ überzugehen.*

(b) Berechnen Sie die Suszeptibilität $\chi_1(T)$ im thermischen Gleichgewicht in der geordneten Phase.
*Hinweis: Sie dürfen annehmen, dass in der geordneten Phase im Gleichgewicht $\lim_{h\to 0}\phi_+ = 0$ gilt.*

(c) **10 Bonuspunkte:**
Beweisen Sie nun, dass in der geordneten Phase bei $h = 0$ im Gleichgewicht $\phi_1 = -\phi_2$ ist.

**Lösung:**

(a) Wir transformieren zunächst $\phi_{1,2} \to \phi_\pm$ wie im Hinweis angegeben:

$$f(\phi_+, \phi_-) = 2[a(T - T_0) + g]\phi_+^2 + 2a(T - T_0)\phi_-^2 + 2b\left(\phi_+^4 + 6\phi_+^2\phi_-^2 + \phi_-^4\right) - 2h\phi_+$$ **(3 P)**

Dadurch ist der Kopplungsterm $\propto \phi_1\phi_2$ verschwunden.

In der ungeordneten Phase gilt $\phi_1, \phi_2 \to 0$ für $h \to 0$, also $\phi_{1,2}^4 \ll \phi_{1,2}^2$, so dass die Terme vierten Grades vernachlässigt werden können. **(1 P)**

Das Gleichgewicht ist durch das globale Minimum von $f$ gegeben. **(1 P)**

Dort muss gelten: $\partial_{\phi_+} f = \partial_{\phi_-} f = 0$, also

$$2[a(T - T_0) + g]\phi_+ = h$$ **(1 P)**

$$a(T - T_0)\phi_- = 0$$ **(1 P)**

Durch Ableiten nach $h$ **(1 P)** erhalten wir für $h \to 0$ mit den Suszeptibilitäten $\chi_\pm = \lim_{h\to 0} \partial\phi_\pm/\partial h$:

$$2[a(T - T_0) + g]\chi_+ = 1 \quad \Rightarrow \quad \chi_+ = \frac{1}{2[a(T - T_0) + g]}$$ **(2 P)**

und

$$a(T - T_0)\chi_- = 0 \quad \Rightarrow \quad \chi_- = 0$$ **(2 P)**

Mit $\chi_{1,2} = \chi_+ \pm \chi_-$ gilt also

$$\chi_1 = \chi_2 = \chi_+ = \frac{1}{2[a(T - T_0) + g]}$$ **(2 P)**

(b) Nun sind die Terme vierten Grades nicht vernachlässigbar. Dann erhalten wir analog zu (a) für die kritischen Punkte ($\partial f/\partial\phi_\pm = 0$)

$$2[a(T-T_0)+g]\phi_+ + 12b\phi_-^2\phi_+ + 4b\phi_+^3 = h \qquad \textbf{(2 P)}$$
$$a(T-T_0)\phi_- + 6b\phi_+^2\phi_- + 2b\phi_-^3 = 0 \qquad \textbf{(2 P)}$$

und für die Suszeptibilitäten mit $\phi_\pm(0) := \phi_\pm(h=0)$:

$$2[a(T-T_0)+g]\chi_+ + 12b\left[\phi_-^2(0)+\phi_+^2(0)\right]\chi_+ + 24b\phi_+(0)\phi_-(0)\chi_- = 1 \qquad \textbf{(1 P)}$$
$$a(T-T_0)\chi_- + 6b\left[\phi_+^2(0)+\phi_-^2(0)\right]\chi_- + 24b\phi_+(0)\phi_-(0)\chi_+ = 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$

Unter Verwendung des Hinweises, dass $\phi_+(h=0)=0$ im Gleichgewicht, d.h. am globalen Minimum, vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$2[a(T-T_0)+g]\chi_+ + 12b\phi_-^2(0)\chi_+ = 1 \quad \Rightarrow \quad \chi_+ = \frac{1}{2[a(T-T_0)+g]+12b\phi_-^2(0)} \qquad \textbf{(2 P)}$$
$$a(T-T_0)\chi_- + 6b\phi_-^2(0)\chi_- = 0 \quad \Rightarrow \quad \chi_- = 0 \qquad \textbf{(2 P)}$$

Nun muss noch $\phi_-(0)$ im Gleichgewicht bestimmt werden. Kritische Punkte für $h=0$ erhält man unter der Bedingung $\phi_+=0$ nur in folgenden zwei Fällen:

1. $\phi_+ = \phi_- = 0$: ungeordnete Phase $\Rightarrow$ nicht von Interesse
2. $\phi_+ = 0$ und $\phi_-^2 = -\dfrac{a(T-T_0)}{2b}$

Also ist in der geordneten Phase $\phi_-^2 = -\dfrac{a(T-T_0)}{2b}$. **(4 P)**
Damit lauten die Suszeptibilitäten:

$$\chi_1 = \chi_2 = \chi_+ = \frac{1}{2[2a(T_0-T)+g]} \qquad \textbf{(2 P)}$$

*Bemerkung: Der Verlauf der Suszeptibilität ist in Abbildung 1 dargestellt und hat die für einen Übergang vom Para- zum Antiferromagneten übliche Form.*

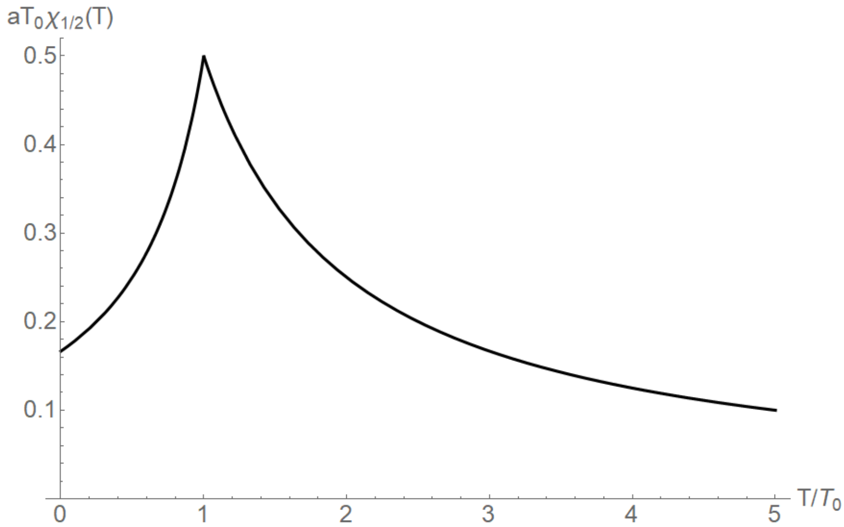


**Abbildung 1:** Die Suszeptibilität der antiferromagnetisch gekoppelten Ordnungsparameter für $g = aT_0$.

(c) Ohne Beschränkung auf $\phi_+ = 0$ erhält man kritische Punkte von $f$ in folgenden Fällen:

1. $\phi_+ = \phi_- = 0$ (unabhängig von $T$)
2. $\phi_+ = 0$ und $\phi_-^2 = -\dfrac{a(T-T_0)}{2b}$ wobei $T < T_0$ gelten muss
3. $\phi_- = 0$ und $\phi_+^2 = -\dfrac{a(T-T_0)+g}{2b}$ wobei $T < T_0 - \dfrac{g}{a}$ $(< T_0)$ gelten muss **(1 P)**
4. $\phi_+ \neq 0$, $\phi_- \neq 0$, bestimmt durch das Gleichungssystem

$$a(T-T_0) + g + 6b\phi_-^2 + 2b\phi_+^2 = 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$
$$a(T-T_0) + 6b\phi_+^2 + 2b\phi_-^2 = 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$

mit der Lösung

$$\phi_+^2 = -\frac{1}{8b}\left(a(T-T_0) + \frac{3}{2}g\right) \qquad \phi_-^2 = -\frac{1}{8b}\left(a(T-T_0) - \frac{1}{2}g\right) \qquad \textbf{(2 P)}$$

Dieser Fall erfordert $a(T-T_0) + \frac{3}{2}g < 0$. **(1 P)**

Das globale Minimum kann man am einfachsten bestimmen, indem man $f(\phi_+, \phi_-)$ für alle vier Fälle berechnet und vergleicht (auf die Auswertung der zweiten Ableitungen kann verzichtet werden, da wir wissen dass das globale Minimum hier auch ein lokales Minimum sein muss):

1. $f_1 = 0$
2. $f_2 = -\frac{a(T-T_0)}{2b}$, wobei $f_2 < 0$ wegen $T < T_0$
3. $f_3 = 0 > f_2$, also beschreibt dieser Fall niemals das globale Minimum. **(1 P)**
4. Hier erhält man

$$\begin{aligned} f_4 &= -\frac{1}{4b}\left[a^2(T-T_0)^2 + a(T-T_0)g + \frac{7}{4}g^2\right] \\ &> -\frac{1}{4b}\left[a^2(T-T_0)^2 + \frac{7}{4}g^2\right] \\ &> -\frac{4}{9b}a^2(T-T_0)^2 > -\frac{1}{2}a^2(T-T_0)^2 = f_2\,, \end{aligned} \qquad \textbf{(3 P)}$$

wobei wir in der ersten Ungleichung verwendet haben, dass $a(T-T_0)g < 0$ und in der zweiten $g^2 < \frac{4}{9}a^2(T-T_0)^2$.

Insgesamt liefert für alle $T < T_0$ (= geordnete Phase) der zweite Fall das globale Minimum. Damit ist im Gleichgewicht $\phi_+ = 0$ und daher $\phi_1 = -\phi_2$.

**3. Master-Gleichung:** $(14 + 16 = 30$ Punkte$)$

Betrachten Sie ein Drei-Niveau-Atom mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die Wahrscheinlichkeiten, das Atom in den entsprechenden Zuständen zu finden, werden als $p_i(t)$ bezeichnet ($i = 1, 2, 3$). Nehmen Sie an, dass ein klassisches elektromagnetisches Feld Übergänge von $E_1$ nach $E_3$ und umgekehrt mit den Raten $\gamma_{13} = \gamma_{31}$ antreibt. Desweiteren kann das Niveau $E_3$ spontan in das Niveau $E_2$ mit einer Rate von $\gamma_{32}$ zerfallen, während Zustand $E_2$ mit einer Rate von $\gamma_{21}$ nach $E_1$ zerfallen kann, wobei die inversen Prozesse nicht auftreten sollen ($\gamma_{23} = \gamma_{12} = 0$).

(a) Geben Sie die Master-Gleichungen für $\{p_i\}$ an. Finden Sie die Gleichgewichtslösungen $p_i(t = \infty)$ der Master-Gleichung. Welche Bedingung müssen die Raten erfüllen, damit im Gleichgewicht eine Besetzungsinversion der atomaren Niveaus auftritt, d.h. $p_2(\infty) > p_1(\infty)$?

(b) Betrachten Sie nun $N$ unabhängige solcher Drei-Niveau-Atome in einem Hohlraum (elektromagnetischer Resonator). Die Photonen im Hohlraum können von den Atomen absorbiert werden ($E_1 \to E_2$) und auch einen stimulierten Übergang $E_2 \to E_1$ hervorrufen. Insgesamt sind die Übergangsraten zwischen den Niveaus $E_1$ und $E_2$ nun $\gamma_{12} = \gamma\, n$ und $\gamma_{21} = \gamma\,(n+1)$, während $\gamma_{13}, \gamma_{31}, \gamma_{23}, \gamma_{32}$ unverändert bleiben. Dabei bezeichnet $n$ die Anzahl der Photonen im Hohlraum. Die Master-Gleichung für $n$ (zusätzlich zu den Gleichungen für $p_i$) lautet dann

$$\dot{n} = \gamma\, N\, [(n+1)p_2 - np_1] - \Gamma n.$$

Der letzte Term beschreibt einen Abfluss von Photonen aus dem Hohlraum mit der Rate $\Gamma$.

Drücken Sie $p_i(\infty)$ durch $n(\infty)$ und die Übergangsraten aus. Bestimmen Sie $p_i(\infty)$ und $n(\infty)$ im Limes $\gamma_{13} \to \infty$.

**Lösung:**

(a) Die Master-Gleichung für den Vektor der Wahrscheinlichkeiten lautet

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_1 \\ \dot{p}_2 \\ \dot{p}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma_{13} & \gamma_{21} & \gamma_{13} \\ 0 & -\gamma_{21} & \gamma_{32} \\ \gamma_{13} & 0 & -\gamma_{32} - \gamma_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(4 P)}$$

Im Gleichgewicht verschwindet die linke Seite und wir müssen das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} -\gamma_{13} & \gamma_{21} & \gamma_{13} \\ 0 & -\gamma_{21} & \gamma_{32} \\ \gamma_{13} & 0 & -\gamma_{32} - \gamma_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1(\infty) \\ p_2(\infty) \\ p_3(\infty) \end{pmatrix} = 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$

zusammen mit der Normierungsbedingung $p_1(\infty) + p_2(\infty) + p_3(\infty) = 1$ **(1 P)** lösen. Es ergibt sich

$$\begin{pmatrix} p_1(\infty) \\ p_2(\infty) \\ p_3(\infty) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\gamma_{21}\gamma_{13} + \gamma_{32}(\gamma_{21} + \gamma_{13})} \begin{pmatrix} \gamma_{21}(\gamma_{32} + \gamma_{13}) \\ \gamma_{32}\gamma_{13} \\ \gamma_{21}\gamma_{13} \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(5 P)}$$

Damit ist eine Besetzungsinversion zwischen erstem und zweitem Niveau äquivalent zu

$$1 > \frac{p_1(\infty)}{p_2(\infty)} = \frac{\gamma_{21}(\gamma_{32} + \gamma_{13})}{\gamma_{32}\gamma_{13}} \quad \Leftrightarrow \quad \gamma_{21} < \frac{\gamma_{32}\gamma_{13}}{\gamma_{32} + \gamma_{13}}. \qquad \textbf{(3 P)}$$

(b) Die Master-Gleichung für die neue Situation ist

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_1 \\ \dot{p}_2 \\ \dot{p}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma_{13} - \gamma n & \gamma(n+1) & \gamma_{13} \\ \gamma n & -\gamma(n+1) & \gamma_{32} \\ \gamma_{13} & 0 & -\gamma_{32} - \gamma_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(2 P)}$$

Zusammen mit der Differentialgleichung für $n$ erhalten wir im Gleichgewicht das nichtlineare System **(2 P)**

$$\begin{aligned}
\gamma n(\infty)p_1(\infty) - \gamma(n(\infty)+1)p_2(\infty) + \gamma_{32}p_3(\infty) &= 0\,, && \text{(i)}\\
\gamma_{13}p_1(\infty) - (\gamma_{13}+\gamma_{32})p_3(\infty) &= 0\,, && \text{(ii)}\\
\gamma N[(n(\infty)+1)p_2(\infty) - n(\infty)p_1(\infty)] - \Gamma n(\infty) &= 0\,, && \text{(iii)}\\
p_1(\infty) + p_2(\infty) + p_3(\infty) &= 1 && \text{(iv)}
\end{aligned}$$

für $p_1(\infty)$, $p_2(\infty)$, $p_3(\infty)$ und $n(\infty)$. Wir lösen zunächst (i), (ii) und (iv) nach den Wahrscheinlichkeiten auf und finden

$$\begin{pmatrix} p_1(\infty) \\ p_2(\infty) \\ p_3(\infty) \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma_{32}\gamma_{13} + \gamma[(\gamma_{32}+\gamma_{13})n(\infty) + (\gamma_{32}+2\gamma_{13})(n(\infty)+1)]} \cdot \begin{pmatrix} \gamma(\gamma_{32}+\gamma_{13})(n(\infty)+1) \\ \gamma_{32}\gamma_{13} + \gamma(\gamma_{32}+\gamma_{13})n(\infty) \\ \gamma\gamma_{13}(n(\infty)+1) \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(5 P)}$$

Für $\gamma_{13} \to \infty$ vereinfacht sich dieses Resultat zu

$$\begin{pmatrix} p_1(\infty) \\ p_2(\infty) \\ p_3(\infty) \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma_{32} + 2\gamma + 3\gamma n(\infty)} \begin{pmatrix} \gamma(n(\infty)+1) \\ \gamma_{32} + \gamma n(\infty) \\ \gamma(n(\infty)+1) \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(2 P)}$$

Die Besetzungsinversion ergibt sich hier (ähnlich wie zuvor) für $\gamma < \gamma_{32}$. Wir setzen $p_1(\infty)$ und $p_2(\infty)$ in Gleichung (iii) ein und erhalten die Gleichung

$$\begin{aligned}
& N\frac{\gamma\gamma_{32}(n(\infty)+1)}{\gamma_{32}+2\gamma+3\gamma n(\infty)} = \Gamma n(\infty) \\
\Leftrightarrow\ & n(\infty)^2 + \frac{N\gamma_{32}}{3\Gamma}\left[\frac{\Gamma(2\gamma+\gamma_{32})}{N\gamma\gamma_{32}} - 1\right] n(\infty) - \frac{N\gamma_{32}}{3\Gamma} = 0 \qquad \textbf{(2 P)}
\end{aligned}$$

für $n(\infty)$. Ihre positive Lösung ist

$$n(\infty) = \frac{N\gamma_{32}}{6\Gamma}\left[\sqrt{\left(\frac{\Gamma(2\gamma+\gamma_{32})}{N\gamma\gamma_{32}} - 1\right)^2 + \frac{12\Gamma}{N\gamma_{32}}} - \left(\frac{\Gamma(2\gamma+\gamma_{32})}{N\gamma\gamma_{32}} - 1\right)\right]. \qquad \textbf{(2 P)}$$

Für die Wahrscheinlichkeiten finden wir

$$p_1(\infty) = \frac{\gamma(n(\infty)+1)}{\gamma_{32}+\gamma n(\infty)}p_2(\infty) = p_3(\infty) = \frac{\Gamma n(\infty)}{N\gamma_{32}}. \qquad \textbf{(1 P)}$$