

Prof. Dr. Andreas Mielke
Institut für Theoretische Physik
Universität Heidelberg
Philosophenweg 19
69120 Heidelberg
Germany

<http://www.tphys.uni-heidelberg.de/mielke/>
e-mail: mielke@tphys.uni-heidelberg.de

Dissipative Quantensysteme

Andreas Mielke

Sommersemester 2002
Zeit: Donnerstag, 9-11
Ort: Philosophenweg 16, Seminarraum

Dieses Script wird fortlaufend ergänzt.

Abstract

Isolierte quantenmechanische Systeme lassen sich durch einen Hamiltonoperator mit wohldefinierten Eigenzuständen beschreiben. Befindet sich das System in einem Eigenzustand, dann bleibt es für alle Zeiten in diesem Zustand. Isolierte Quantensysteme gibt es aber in der Realität nicht. Selbst ein Wasserstoffatom im Vakuum wechselwirkt mit dem Strahlungsfeld und ist deshalb nur im Grundzustand stabil. Betrachtet man quantenmechanische Systeme in Wechselwirkung mit ihrer Umgebung, dann wird Energie zwischen dem System und der Umgebung ausgetauscht. Dabei treten neue Phänomene auf, die in isolierten Systemen nicht beobachtet werden. In der Vorlesung werden wir Methoden kennenlernen, mit denen sich solche Systeme beschreiben lassen, und wir werden eine Reihe von Phänomenen diskutieren, die in diesen Systemen beobachtet werden. Anwendungen gibt es in allen Bereichen der modernen Physik, von der Festkörperphysik bis hin zur Hochenergiephysik.

Hinweise zu diesem Text

Das Manuscript ist in unterschiedlichen Formaten verfügbar. Ich empfehle die Verwendung der pdf-Version und den Acrobat Reader, da an vielen Stellen von den zusätzlichen Möglichkeiten des pdf Gebrauch gemacht wird. Beispielsweise sind alle Verweise innerhalb des Textes aktive Verknüpfungen. Links für Zitate sind **dunkelrot**, Links auf Textstellen **dunkelblau**, Links auf http-Adressen **dunkelgrün** eingefärbt. Diese können sie nutzen, wenn Sie den Acrobat Reader so konfigurieren, daß bei Verweisen auf externe Quellen ein WWW-Browser die entsprechenden Seiten anzeigt.

Das Manuscript wird fortlaufend erweitert und ergänzt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Einführung in dissipative Systeme	5
2.1	Als Vorübung: Klassische Systeme	5
2.2	Der dissipative harmonische Oszillator	6
2.3	Rauschen in der Quantenmechanik	9
2.4	Der harmonische Oszillator	10
2.5	Das quantenmechanische Zwei-Zustands-System	11
2.6	Ein Nukleon in einer Pionenwolke	12
2.7	Fermionische Bäder	12
3	Das Spin-Boson-Modell	13
3.1	Der Fall $\Delta = 0$	13
3.2	Endliche Δ	14
3.3	Adiabatische Renormierung	15
3.3.1	Das Ohmsche Bad	16
3.3.2	Das super-Ohmsche Bad	17
3.3.3	Das sub-Ohmsche Bad	17
3.4	Flußgleichungen	18
3.4.1	Bemerkungen zur Methode	18
3.4.2	Transformation des Hamiltonoperators	19
3.4.3	Lösung der Gleichungen	21
3.4.4	Transformation der Observablen	24
4	Das Kondopproblem	27
4.1	Das Anderson-Modell	27
4.2	Das Kondomodell	32
4.2.1	Schrieffer-Wolff Transformation	33
4.2.2	Flußgleichungen	34
4.3	Lösungsmethoden	34
5	Kompliziertere dissipative Quantensysteme	36
5.1	Gekoppelte Tunnelsysteme	36
5.2	Geringe Störstellendichte	37
5.3	Höhere Störstellendichte	39

6	Das Polaron	41
6.1	Einführung	41
6.2	Störungstheorie	41
6.3	Variationsansatz	42
6.4	Starke Kopplung	44

1 Einleitung

Unter dissipativen Quantensystemen versteht man Quantensysteme, die mit ihrer Umgebung in Wechselwirkung stehen. Das wird in der Modellbildung fast immer berücksichtigt: Man beschreibt das dissipative Quantensystem, indem man die Umgebung explizit im Hamiltonoperator berücksichtigt. In der Regel genügt dann eine einfache Modellierung der Umgebung, da Details der Umgebung für das Verhalten des Quantensystems keine wesentliche Rolle spielen sollten. Selbstverständlich gilt dies nicht immer. Speziell bei tiefen Temperaturen wird die Struktur der Umgebung wichtiger.

Klassische Beispiele für dissipative Quantensysteme sind Atome im Strahlungsfeld, Nukleonen in einer Pionenwolke und magnetische Störstellen im Festkörper (Kondoprobem). Typisch für diese Systeme ist das Auftreten von unterschiedlichen Energieskalen. Die charakteristischen Energieskalen des Quantensystems werden durch die Wechselwirkung mit der Umgebung stark renormiert. Deshalb benötigt man für die Behandlung von solchen Systemen Verfahren, mit starke Renormierungseffekte behandelt werden können. Deshalb haben dissipative Quantensysteme eine wichtige Rolle bei der Entwicklung von Renormierungsverfahren gespielt. Die erste Arbeit von K. Wilson zu Renormierungsverfahren behandelte ein Nukleon in einer Pionenwolke. Die numerische Renormierung wurde von Wilson für das Kondoprobem entwickelt.

2 Einführung in dissipative Systeme

In diesem Kapitel geht es zunächst darum, einen knappen Überblick über das Gebiet zu bekommen. Nach einer knappen Diskussion von Dissipation in klassischen Systemen werden wir kurz ein einfaches quantenmechanisches Modell diskutieren, das sich exakt lösen läßt: Den dissipativen harmonischen Oszillator. Anschließend werden wir einige klassische dissipative Systeme kurz vorstellen, die später in der Vorlesung ausführlicher behandelt werden.

2.1 Als Vorübung: Klassische Systeme

Eine anschauliche Modellierung von dissipativen Systemen besteht darin, das System direkt mit einem Wärmebad wechselwirken zu lassen. Die Hamiltonfunktion (oder für ein quantenmechanisches System der Hamiltonoperator) hat dann die Form

$$H = H_S + H_B + H_{SB} \quad (1)$$

H_S beschreibt dabei das System, H_B die Umgebung (Wärmebad) und H_{SB} die Kopplung zwischen System und Umgebung. In einem solchen Modell besteht schon konzeptionell eine Asymmetrie: Man interessiert sich letztlich nur für die Bewegung des Systems; für das System sind auch Informationen vorhanden und es ist eventuell experimentell zugänglich. Physikalische Details des Wärmebades und auch der Kopplung des Systems an das Wärmebad sind dagegen unbekannt. In der Regel beschreibt man das System zum Beispiel durch zeitabhängige Korrelationsfunktionen, wobei über die Freiheitsgrade des Bades gemittelt wird. Die Erwartung ist, daß die Resultate von den Details des Bades unabhängig sind. Diese Vorstellung entspricht dem, was man von einem Wärmebad in der statistischen Physik immer annimmt: Wenige globale Eigenschaften wie Temperatur oder chemisches Potential sollten ausreichen, um das Bad zu charakterisieren. Wenn dem so ist, dann liegt es nahe, das Bad durch harmonische Oszillatoren zu beschreiben. Ein einfaches Modell für ein Teilchen in einem Potential, das in Wechselwirkung mit einem Wärmebad steht, kann durch die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) + \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i}{2} \tilde{\omega}_i^2 q_i^2 \right) + \sum_i \lambda_i (q - q_i)^2 \quad (2)$$

beschrieben werden. Die Bewegungsgleichungen sind die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (3)$$

Man erhält

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad (4)$$

$$\dot{p} = F(q) - 2 \sum_i \lambda_i (q - q_i) \quad (5)$$

$$\dot{q}_i = \frac{p_i}{m_i} \quad (6)$$

$$\dot{p}_i = -m_i \tilde{\omega}_i^2 q_i - 2\lambda_i (q_i - q) \quad (7)$$

Diese Gleichungen lassen sich weiterbehandeln, indem man zunächst die Bewegungsgleichungen für die Badvariablen integriert und das Ergebnis in die Gleichung für die Systemvariable einsetzt. Dabei treten Integrationskonstanten auf, die mit den Anfangsbedingungen der Badvariablen zusammenhängen. Diese Anfangsbedingungen sind natürlich unbekannt, man muß an dieser Stelle also geeignete statistische Annahmen machen. An Stelle einer allgemeinen Diskussion betrachten wir als einfaches Beispiel einen harmonischen Oszillator, der an eine Umgebung gekoppelt ist. Dieses Beispiel kann direkt auf ein erstes, einfaches dissipatives Quantensystem übertragen werden.

2.2 Der dissipative harmonische Oszillator

Die Hamiltonfunktion für dieses einfache Modell ist

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \tilde{\omega}^2 q^2 + \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i}{2} \tilde{\omega}_i^2 q_i^2 \right) + \sum_i \lambda_i (q - q_i)^2. \quad (8)$$

Es ist zweckmäßig, die Quadrate in (8) auszumultiplizieren. Dabei treten die Größen $\omega^2 = \tilde{\omega}^2 + \frac{2}{m} \sum_i \lambda_i$, $\omega_i^2 = \tilde{\omega}_i^2 + \frac{2}{m_i} \lambda_i$ auf. ω muß endlich sein, d.h. $\sum_i \lambda_i$ muß definiert sein. Analog zur Quantenmechanik ist es günstig, statt mit Ort und Impuls mit den komplexen Koordinaten

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{m\omega} q + ip/\sqrt{m\omega}) \quad (9)$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{m_i \omega_i} q_i + ip_i/\sqrt{m_i \omega_i}) \quad (10)$$

und ihren komplex Konjugierten zu rechnen. Es gilt

$$q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (b + b^*) \quad (11)$$

$$p = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\omega}{2}} (b - b^*) \quad (12)$$

und analog für q_i und p_i . Mit Hilfe dieser Größen kann die Hamiltonfunktion in der Form

$$H = \omega b^* b + \sum_i \omega_i b_i^* b_i - \sum_i \frac{\lambda_i}{\sqrt{m\omega m_i \omega_i}} (b + b^*) (b_i + b_i^*) \quad (13)$$

geschrieben werden. Die Kopplungskonstante im letzten Term bezeichnen wir im folgenden mit $g_i = \frac{\lambda_i}{\sqrt{m\omega m_i \omega_i}}$. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für die neue Hamiltonfunktion (13) sind $\dot{b} = -i\frac{\partial H}{\partial b^*}$ und analog für b_i sowie die komplex konjugierten Gleichungen. Man erhält

$$\dot{b}_i = -i\omega_i b_i + ig_i(b + b^*) \quad (14)$$

$$\dot{b} = -i\omega b + i \sum_i g_i(b_i + b_i^*) \quad (15)$$

Die erste Gleichung kann direkt integriert werden.

$$b_i = b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + ig_i \int_0^t \exp(-i\omega_i(t-t'))(b(t') + b^*(t')) dt' \quad (16)$$

Wir setzen dieses Ergebnis in die zweite Gleichung ein und erhalten eine Bewegungsgleichung für b

$$\dot{b} = -i\omega b - 2i \sum_i g_i^2 \int_0^t \sin(\omega_i(t-t'))(b(t') + b^*(t')) dt' + i \sum_i g_i(b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + b_{i0}^* \exp(i\omega_i t)) \quad (17)$$

Der erste Term in dieser Gleichung ist die ursprüngliche Oszillation des harmonischen Oszillators. Der zweite Term ist eine effektive Rückkopplung: Die Bewegung des Systems hängt offenbar von seiner Vergangenheit ab. Wir werden gleich eine plausible Annahme machen, die dazu führt, daß diese Rückkopplung nicht auftritt, der zweite Term beschreibt dann nur noch die Reibung oder die Dissipation. Der dritte Term hängt von den Anfangsbedingungen der Badoszillatoren ab. Er besteht aus einer Summe vieler kleiner Terme, über die wir nichts genaues wissen. Dieser Term wird die Rolle einer stochastischen Kraft spielen.

Im folgenden nehmen wir an, daß die harmonischen Oszillatoren b_i ein thermodynamisch großes Bad bilden. Man kann dann den thermodynamischen Limes durchführen. Wir nehmen an, daß die Frequenzen ω_i kontinuierlich verteilt sind. Dann ist

$$G(\omega') = 2 \sum_i g_i^2 \delta(\omega' - \omega_i) \quad (18)$$

eine kontinuierliche Funktion und die Summe im zweiten Term kann in der Form

$$\int d\omega' G(\omega') \sin(\omega'(t-t')) = -\frac{d}{dt'} \int d\omega' \frac{G(\omega')}{\omega'} \cos(\omega'(t-t')) = -\frac{d}{dt'} R(t-t') \quad (19)$$

geschrieben werden. Das Verhalten der Funktion $G(\omega)$ oder alternativ der Funktion $R(t)$ beschreibt das Bad und die System-Bad Kopplung. Für die Bewegungsgleichung erhält man

$$\begin{aligned} \dot{b} = & -i\omega b + iR(0)(b + b^*) - iR(t)(b(0) + b^*(0)) - i \int_0^t dt' R(t-t')(b(t') + b^*(t')) \\ & + i \sum_i g_i(b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + b_{i0}^* \exp(i\omega_i t)) \end{aligned} \quad (20)$$

Der zweite Term in dieser Gleichung führt zu einer Verschiebung der Frequenz ω . Damit die Gleichung wohldefiniert ist, muß $2R(0) \leq \omega$ gelten. $R(t)$ ist eine Summe vieler oszillierender Beiträge und wird daher für große t schnell abfallen. Daher trägt der dritte Term nur für sehr kleine t bei und der vierte Term liefert Beiträge für $t \approx t'$. Damit erhält man aus dem Realteil und dem Imaginärteil dieser Gleichung die Bewegungsgleichungen für p und q .

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \quad (21)$$

$$\dot{p} = -m\omega^2 q + 2m\omega R(0)q - 2m\omega R(t)q(0) - \kappa \dot{q} + \sqrt{2m\omega} \sum_i g_i(b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + b_{i0}^* \exp(i\omega_i t)) \quad (22)$$

Daraus ergibt sich

$$m\ddot{q} = -m\omega_{\text{ren}}^2 q - \kappa\dot{q} + F(t) \quad (23)$$

mit

$$\kappa \approx 2m\omega \int_0^\infty dt R(t) \quad (24)$$

$$\omega_{\text{ren}} = \sqrt{\omega^2 - 2\omega R(0)} \quad (25)$$

und

$$F(t) = \sqrt{2m\omega} \sum_i g_i (b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + b_{i0}^* \exp(i\omega_i t)) \quad (26)$$

Damit ω_{ren} reell ist, muß $2R(0) \leq \omega$ gelten; diese Ungleichung hatten wir oben schon gesehen.

Man sieht also, daß der vierte Term in der Gleichung für b direkt die Stokessche Reibung liefert, wenn $R(t)$ eine schnell mit t abfallende Funktion ist. Wir diskutieren weiter unten, welche Bedingungen dazu genau zu erfüllen sind. Der fünfte Term liefert eine zeitabhängige Kraft $F(t)$. Die Kraft $F(t)$ hängt von den (unbekannten) Anfangsbedingungen des Bades ab. Typischerweise kennt man nur statistische Eigenschaften des Bades. Von den Anfangsbedingungen sind also nur statistische Eigenschaften bekannt, zum Beispiel die Verteilungsfunktion. Damit wird $F(t)$ eine stochastische Größe, von der die Verteilungsfunktion oder eventuell nur einzelne Momente bekannt sind. Wir berechnen die zweiten Momente

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2m\omega \sum_{ij} g_i g_j \langle (b_{i0} \exp(-i\omega_i t) + b_{i0}^* \exp(i\omega_i t)) (b_{j0} \exp(-i\omega_j t') + b_{j0}^* \exp(i\omega_j t')) \rangle \quad (27)$$

Wenn wir annehmen, daß die Anfangswerte von unterschiedlichen Badmoden unabhängig verteilt sind, dann treten in der Summe nur Terme mit $i = j$ auf. Die Erwartungswerte $\langle b_{i0}^* b_{i0} \rangle$ hängen von ω_i ab. Damit erhält man

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 4m\omega \sum_i g_i^2 \langle b_{i0}^* b_{i0} \rangle \cos(\omega_i(t - t')) \quad (28)$$

Wegen des Gleichverteilungssatzes gilt

$$\langle b_{i0}^* b_{i0} \rangle = \frac{k_B T}{\omega_i} \quad (29)$$

und man erhält

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 4m\omega k_B T \sum_i \frac{g_i^2}{\omega_i} \cos(\omega_i(t - t')) = 4m\omega k_B T R(t - t') \quad (30)$$

Das zweite Moment der fluktuierenden Kraft hängt also direkt mit der Dissipation zusammen. Wenn $R(t)$ schnell abfällt, dann kann man $R(t)$ durch

$$R(t) \approx \delta(t) \int dt' R(t') = \frac{\kappa}{m\omega} \delta(t) \quad (31)$$

ersetzen. Das ist natürlich im Widerspruch zu der oben hergeleiteten Ungleichung $2R(0) \leq \omega$. In der Tat ist $R(t) \propto \delta(t)$ nur eine in bestimmter Näherung gerechtfertigte Annahme. Wir können diese Annahme nur machen, wenn wir zusätzlich ω_{ren} festhalten und reell wählen. Allerdings ist die Annahme $R(t) \propto \delta(t)$ physikalisch sinnvoll, da man in der Regel annehmen wird, daß keine Korrelation zwischen zwei aufeinanderfolgenden Kraftstößen von Teilchen des Bades auf das Teilchen bestehen. Die Korrelationszeit τ für $F(t)$, die den Abfall von $R(t)$ festlegt, ist also etwa die Stoßzeit für solche Stöße. Solange τ klein im Vergleich zu ω^{-1} oder anderen charakteristischen Zeitskalen des Systems ist, ist die δ -Funktion als Näherung gerechtfertigt.

Ein zeitlich unkorreliertes Rauschen nennt man weiß. Man erhält es für den Fall, daß $G(\omega)/\omega$ (und äquivalent g_i^2/ω_i) konstant ist. Da $R(0)$ endlich sein muß, kann das nicht wirklich gelten. Man benötigt immer einen Ultraviolett-Cutoff ω_c . Im Limes $\omega_c \rightarrow \infty$ erhält man ein weißes Rauschen. Typischerweise wird man aber eine schwache Abhängigkeit von ω_i haben und damit statt der δ -Funktion eine abfallende Funktion mit einer Korrelationszeit τ erhalten.

Sowohl die Reibungskonstante κ als auch das zweite Moment der Kraft $F(t)$ werden durch G parametrisiert. Beide sind also nicht unabhängig. Der Zusammenhang zwischen beiden ist ein einfaches Beispiel für ein Fluktuations-Dissipations-Theorem.

Wenn die Masse m des harmonischen Oszillators hinreichend groß ist, dann kann typischerweise der Effekt der fluktuierenden Kraft $F(t)$ vernachlässigt werden. Man erhält dann die übliche Bewegungsgleichung mit Reibung. Für kleine Massen dagegen ist $F(t)$ wichtig.

Wesentlich ist auch der Übergang zum thermodynamischen Limes. Ohne diesen Übergang erhält man immer ein System mit charakteristischen Eigenmoden.

2.3 Rauschen in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik beschreibt man den Zustand eines Systems durch eine Wellenfunktion oder durch eine Dichtematrix. Will man die Wechselwirkung eines quantenmechanischen Systems mit seiner Umgebung beschreiben, dann ist die Beschreibung durch eine Wellenfunktion nicht zweckmäßig. Um das zu erreichen, bräuchte man eine genaue Kenntnis des Systems und seiner Umgebung. Das widerspricht den physikalischen Ansätzen aus der klassischen Beschreibung völlig. Eine bessere Beschreibung des Systems erreicht man durch eine Dichtematrix.

Modelliert man ein quantenmechanisches System durch einen Hamiltonoperator H_S , dann erhält man für die Dichtematrix die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -i[\rho_S, H_S] \quad (32)$$

In einer effektiven Beschreibung des Systems durch ρ_S kann die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung durch zusätzlich Terme in dieser Gleichung beschrieben werden. Allerdings ist die Situation nicht ganz einfach, da die modifizierte Bewegungsgleichung für ρ_S bestimmte Bedingungen erfüllen muß:

1. $\rho_S \geq \rho_S^2 \geq 0$.
2. $\text{Tr}\rho_S = 1$.
3. $\langle \phi | \rho_S \phi \rangle \leq 1$ für alle ϕ .

Diese Bedingungen müssen zudem für alle Zeiten und für alle zulässigen Anfangsbedingungen der Bewegungsgleichung für ρ_S erfüllt sein.

Um eine Bewegungsgleichung für ρ_S herzuleiten oder um, weniger ambitioniert, Bewegungsgleichungen für einfache Observable (Ort, Impuls) herzuleiten, kann man wie im klassischen Fall zu Beginn der Vorlesung die Umgebung durch harmonische Oszillatoren modellieren. Dies ist in vielen Fällen ausreichend. Der Hamiltonoperator, der das System und die Umgebung beschreibt, ist dann von der Form

$$H = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + A_S \otimes A_B \quad (33)$$

Indices S bezeichnen Operatoren des Systems, Indices B die Umgebung (das Bad). $I_{S,B}$ sind Einheitsoperatoren. Der Hilbertraum, auf dem dieser Hamiltonoperator wirkt, ist das direkte Produkt der Hilberträume von System und Bad.

Da wir den Hilbertraum und den Hamiltonoperator so erweitert haben, daß jetzt System und Umgebung enthalten sind, erhält man jetzt eine Bewegungsgleichung für die volle Dichtematrix ρ

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[\rho, H] \quad (34)$$

Die Dichtematrix für das System ergibt sich aus ρ durch Projektion. Wenn es gelingt, die Projektion schon in der Gleichung für ρ durchzuführen, erhält man eine effektive Gleichung für ρ_S . Das entsprechende gilt natürlich auch für Bewegungsgleichungen für Observable. Die volle Bewegungsgleichung für eine Observable des Systems enthält Beiträge von den Badvariablen. Wenn es gelingt, die Badvariablen zu eliminieren, erhält man effektive Gleichungen für die Observablen des Systems. In dieser Form haben wir für den klassischen dissipativen harmonischen Oszillator die Bewegungsgleichungen gelöst. Betrachten wir jetzt als einfaches Beispiel den dissipativen, quantenmechanischen harmonischen Oszillator.

2.4 Der harmonische Oszillator

Es gilt

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\Omega^2 q^2 \quad (35)$$

$$H_B = \sum_k \left(\frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{m_k}{2}\omega_k^2 q_k^2 \right) \quad (36)$$

$$A_S = q \quad (37)$$

$$A_B = \sum_k g_k q_k \quad (38)$$

wobei wir für die Kopplung die harmonische Näherung gemacht haben, wie schon im klassischen Fall. Führt man Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, so kann man den Hamiltonoperator (bis auf eine Konstante) auch in der Form

$$H = \Omega a^\dagger a + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \lambda_k (a + a^\dagger)(a_k + a_k^\dagger) \quad (39)$$

schreiben. Als Bewegungsgleichungen erhält man

$$\frac{da}{dt} = i\Omega a + i \sum_k \lambda_k (a_k + a_k^\dagger) \quad (40)$$

$$\frac{da_k}{dt} = i\omega_k a_k + i\lambda_k (a + a^\dagger) \quad (41)$$

Die Bewegungsgleichung für a_k kann formal integriert werden

$$a_k(t) = a_k(0) \exp(i\omega_k t) + i\lambda_k \int_0^t dt' \exp(i\omega_k(t-t'))(a(t') + a^\dagger(t')) \quad (42)$$

und man erhält

$$\frac{da}{dt} = i\Omega a + i \sum_k \lambda_k (\exp(i\omega_k t) a_k(0) + \exp(-i\omega_k t) a_k^\dagger(0)) \quad (43)$$

$$-2i \sum_k \lambda_k^2 \int_0^t dt' \sin(\omega_k(t-t'))(a(t') + a^\dagger(t')) \quad (44)$$

Diese Gleichung ist analog zur klassischen Bewegungsgleichung, die wir zu Beginn der Vorlesung hergeleitet haben. Mit ihrer Hilfe kann man zum Beispiel die Korrelationsfunktion $\langle q(t)q(0) \rangle$ berechnen. Man findet

$$\langle q(t)q(0) + q(0)q(t) \rangle = \frac{1}{8m\Omega} \int d\omega C(\omega)(2n(\omega) + 1) \cos(\omega t) \quad (45)$$

mit

$$n(\omega) = \frac{1}{\exp(\omega/T) - 1} \quad (46)$$

$$C(\omega) = \frac{2J(\omega)(\omega^2 + \Omega^2)}{\left(\Omega^2 - \omega^2 + 4\Omega P \left(\int \frac{d\omega' \omega' J(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} \right)\right)^2 + 4\pi^2 \Omega^2 J^2(\omega)} \quad (47)$$

$P(\cdot)$ bedeutet hier den Hauptwert des Integrals. Man sieht dieser Formel mehrere Dinge an:

1. Der erste Term im Nenner von $C(\omega)$ entspricht einem Polterm. Für verschwindende Kopplung an das Bad wird $C(\omega) \propto (\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega))$. Für endliche Kopplungen verschiebt sich die Lage der Maxima zu niedrigeren Werten

$$\Omega_{\text{ren}}^2 = \Omega^2 + 4\Omega P \left(\int \frac{d\omega' \omega' J(\omega')}{\Omega_{\text{ren}}^2 - \omega'^2} \right) \quad (48)$$

Dazu muß natürlich

$$\Omega^2 + 4\Omega P \left(\int \frac{d\omega' \omega' J(\omega')}{\Omega_{\text{ren}}^2 - \omega'^2} \right) \geq 0 \quad (49)$$

gelten. Diese Bedingung garantiert, daß der Hamiltonoperator nach unten beschränkt bleibt.

2. Der zweite Term im Nenner entspricht einer Dämpfung. Es treten keine Pole bei $\omega = \pm\Omega_{\text{ren}}$ auf, sondern Maxima.
3. Im Gegensatz zum klassischen Fall tritt eine Dissipation auch schon bei $T = 0$ auf. Das ist ein Effekt der Quantenfluktuationen.
4. Für endliche Temperaturen ist $C(\omega)(2n(\omega) + 1)$ für kleine ω proportional zu $\frac{T}{\omega} J(\omega)$. Der Fall Stokescher Reibung entspricht also gerade dem Fall $J(\omega) \propto \omega$, dann fällt die Korrelationsfunktion exponentiell ab, wie im klassischen Fall.
5. Für $T = 0$, wenn es also nur Quantenfluktuationen gibt, ist $n(\omega) = 0$ und damit $C(\omega) \propto J(\omega)$ für kleine ω . Ist wieder $J(\omega) \propto \omega$, dann erhält man einen algebraischen Zerfall der Korrelationsfunktion $\propto t^{-2}$.
6. In der Quantenmechanik können auch andere Bäder realisiert sein. Es gibt also quantenmechanische Bäder, in denen keine exponentielle Dämpfung auftritt.

2.5 Das quantenmechanische Zwei-Zustands-System

Das dissipative quantenmechanische Zweizustandssystem gilt als Paradigma für dissipative Quantensysteme. Analog zum harmonischen Oszillator lautet der Hamiltonoperator

$$H = H_S \otimes I_B + I_S \otimes H_B + A_S \otimes A_B \quad (50)$$

$$= -\frac{\Delta}{2} \sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sigma_z \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) \quad (51)$$

Das Zwei-Zustands-System wird quantenmechanisch durch eine 2×2 -Matrix beschrieben, die man oBdA proportional zu σ_x wählen kann. Die Kopplung induziert Übergänge zwischen den beiden Zuständen. Das Modell wird Spin-Boson-Modell genannt.

In der letzten Zeit ist das dissipative quantenmechanische Zwei-Zustands-System im Zusammenhang mit Quantencomputern aktuell geworden. Das Zwei-Zustands-System beschreibt ein Quantenbit, das mit seiner Umgebung wechselwirkt. In der Regel wird man versuchen, solche Systeme so zu realisieren, daß die Wechselwirkung mit der Umgebung so schwach wie möglich ist.

Ganz allgemein kann man die zwei Zustände als die niedrigsten Zustände in einem allgemeinen Quantensystem und damit das Modell als Näherung für jedes andere dissipative Quantensystem betrachten. Diese Näherung ist dann besonders gut, wenn die beiden unteren Zustände durch eine größere Lücke vom Rest des Spektrums getrennt sind. Ein typisches Beispiel, in dem das der Fall ist, ist ein Tunnelsystem. Δ ist dann die Tunnelaufspaltung. Abhängig von dem zu untersuchenden System kann die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung stark sein.

Das Modell ist im allgemeinen nicht exakt lösbar, man kennt aber einige exakte Resultate für dieses Modell. Das Langzeitverhalten der dynamischen Korrelationsfunktionen ist für $T = 0$ oder für endliche Temperaturen ähnlich wie beim dissipativen harmonischen Oszillator. Häufig betrachtet man aber andere Eigenschaften. Beispielsweise wird das System in einen festen Anfangszustand gesetzt, und man interessiert sich für die dynamische Entwicklung des Systems aus diesem Zustand. Für solche Korrelationsfunktionen erhält man, im Gegensatz zu den Gleichgewichtskorrelationsfunktionen, meist einen exponentiellen Zerfall: Kerne zerfallen nach einem Exponentialgesetz, Atome in angeregten Zuständen fallen in tieferliegende Zustände nach einem Exponentialgesetz, usw.

Unabhängig davon, ob die Wechselwirkung stark oder schwach ist, kommt es zu starken Renormierungseffekten: Das effektive Tunnelmatrixelement Δ_{eff} ist deutlich kleiner als Δ . Dieser Effekt ist störungstheoretische nicht zugänglich.

2.6 Ein Nukleon in einer Pionenwolke

Ein anderes einfaches dissipatives Zweiniveau-System wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \sum_k \omega_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + g_0 \sum_k (2\omega_k)^{-1/2} [(a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-] \quad (52)$$

beschrieben. a_k und b_k sind bosonische Operatoren, die skalare geladene Mesonen (π^\pm) beschreiben. Sie wechselwirken mit einer ortsfesten Quelle, einem Nukleon, das zwei Zustände (Proton, Neutron) annehmen kann. Die Übergänge zwischen diesen beiden Zuständen werden durch die Paulimatrizen σ_\pm beschrieben. g_0 ist eine Kopplungskonstante und $\omega_k = (k^2 + \mu^2)^{1/2}$, wobei μ die Mesonenmasse ist. Dieses Modell wurde von K. Wilson 1965 vorgeschlagen und analysiert als ein Prototyp für ein Modell einer lokalen Quantenfeldtheorie. Dieses Modell kann störungstheoretische nicht behandelt werden, da die Störungstheorie zu Divergenzen führt. Es muß mit Renormierungsverfahren untersucht werden.

2.7 Fermionische Bäder

In den bisher diskutierten Fällen haben wir nur Wärmebäder untersucht, die sich durch Bosonen beschreiben ließen. In der Realität treten natürlich auch fermionische Bäder auf. Das klassische Beispiel ist das Kondomodell. Es beschreibt eine magnetische Störstelle in einem Festkörper, die mit den Bandelektroden wechselwirkt. Der Hamiltonoperator für dieses Problem lautet

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - 2J\vec{s}(0) \cdot \vec{S} \quad (53)$$

wobei \vec{S} ein Störstellenspin am Ort 0 ist und $\vec{s}(0)$ der Spin der Bandelektronen am Ort 0,

$$\vec{s}(0) = \frac{1}{2} \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} c_{k\sigma}^\dagger(\vec{\sigma})_{\sigma\sigma'} c_{k'\sigma'} \quad (54)$$

Der Hamiltonoperator ist also von der Gestalt eines typischen System-Bad Modells, wobei der reine Systemanteil verschwindet, die System-Bad Wechselwirkung durch die (meist antiferromagnetische, $J < 0$) Spin-Spin Wechselwirkung gegeben ist und das Bad aus Bandelektronen besteht. Kondo hat gezeigt, daß die störungstheoretische Behandlung dieses Modells zusammenbricht. Unterhalb der Kondotemperatur

$$T_K = D \exp\left(\frac{1}{2N(0)J}\right) \quad (55)$$

wobei D die Bandbreite und $N(0)$ die Zustandsdichte an der Fermikante ist, bildet sich ein Singulett aus dem Störstellenspin und den Spins der Leitungselektronen.

3 Das Spin-Boson-Modell

Das Spin-Boson-Modell ist das Standardmodell für dissipative Quantensysteme. Der Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}\sigma_z \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) \quad (56)$$

beschreibt ein zwei Niveaus eines Quantensystems angekoppelt über eine bilineare Kopplung an ein bosonisches Bad. Viele Resultate dieses Modells lassen sich auf andere dissipative Quantensysteme übertragen. Viele Methoden, die auf dieses Modell erfolgreich angewandt werden können, lassen sich auch auf andere dissipative Quantensysteme anwenden. Außerdem hat das Modell konkrete physikalische Anwendungen:

1. Es beschreibt ein dissipatives quantenmechanisches Tunnelsystem bei tiefen Temperaturen.
2. Es beschreibt ein Quantenbit in einem Quantencomputer.

Das Modell wurde in der Vergangenheit intensiv diskutiert. Die Literatur zu diesem Modell ist kaum zu überschauen, ich erwähne daher hier nur die grundlegenden ersten Arbeiten von Caldeira und Leggett [1], den Review-Artikel von Leggett et al. [2] und das Buch von Weiss [3].

3.1 Der Fall $\Delta = 0$

In diesem Grenzfall kann der Hamiltonoperator trivial diagonalisiert werden. Die unitäre Transformation

$$U = \exp\left(-\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)\right) \quad (57)$$

hat die Eigenschaften

$$U b_k U^\dagger = \exp\left(-\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)\right) b_k \exp\left(\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)\right) \quad (58)$$

$$= b_k - \left[\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger), b_k\right] \quad (59)$$

$$= b_k - \frac{\lambda_k}{2\omega_k} \sigma_z \quad (60)$$

und damit gilt

$$U\omega_k b_k^\dagger b_k U^\dagger = \omega_k b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2}\sigma_z \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) + \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (61)$$

$$U\frac{1}{2}\sigma_z \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) U^\dagger = \frac{1}{2}\sigma_z \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) - \frac{\lambda_k^2}{2\omega_k} \quad (62)$$

$$UHU^\dagger = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k - \sum_k \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (63)$$

Der Hamiltonoperator wird so also diagonalisiert, die Grundzustandsenergie ist

$$E_0 = - \sum_k \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (64)$$

In der Regel wird man annehmen, daß die Frequenzen ω_k des Bades kontinuierlich liegen und man wird eine Funktion

$$J(\omega) = \sum_k \lambda_k^2 \delta(\omega - \omega_k) \quad (65)$$

eingeführen. Damit gilt

$$E_0 = - \int \frac{d\omega J(\omega)}{4\omega} \quad (66)$$

Der Hamiltonoperator ist dann wohl definiert, wenn dieses Integral definiert ist. Das bedeutet, daß $J(\omega)$ für kleine ω proportional zu ω^s mit $s > 0$ sein muß. Für $s = 1$ erhält man das Ohmsche Bad. Für große ω muß dagegen das Verhalten ω^s abgeschnitten werden. Wir machen also den Ansatz

$$J(\omega) = K\omega^s f_c(\omega/\omega_c) \quad (67)$$

wobei $f_c(x)$ eine cutoff-Funktion ist (e.g. $f_c(x) = \theta(1 - x)$, $f_c(x) = \exp(-x)$).

3.2 Endliche Δ

Für endliche Δ kann man zunächst die gleiche Transformation durchführen.

$$UHU^\dagger = -\frac{\Delta}{2}U\sigma_x U^\dagger + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k - \sum_k \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (68)$$

Um den ersten Term berechnen zu können, schreiben wir

$$U = \exp(-\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (69)$$

$$= \cos(-i\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) + i \sin(i\sigma_z \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (70)$$

$$= \cos(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) + i\sigma_z \sin(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (71)$$

$$U\sigma_x U^\dagger = [\cos^2(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) - \sin^2(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger))] \sigma_x \quad (72)$$

$$- 2 \cos(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sin(i \sum_k \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sigma_y \quad (73)$$

$$= \cos(i \sum_k \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sigma_x - \sin(i \sum_k \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sigma_y \quad (74)$$

Entwickelt man den cos, dann tritt in erster Ordnung ein Term proportional zu

$$\sum_k \frac{\lambda_k^2}{\omega_k^2} = \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \quad (75)$$

auf. Dieses Integral ist für $s \leq 1$ nicht definiert. Die Rechnung ist so also nicht durchführbar, zumindest nicht für $s \leq 1$. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, dieses Problem zu lösen, zum Beispiel kann man einen Infrarotcutoff (i.e. eine kleinste Frequenz) einführen. Dies ist im Prinzip durchführbar, aber es gibt (formal) einfachere Möglichkeiten, sich einen Überblick über das mögliche Verhalten des Systems zu machen.

3.3 Adiabatische Renormierung

Wir werden uns jetzt ein einfaches Renormierungsverfahren ansehen, mit dem man das Modell behandeln kann. Die Idee des Verfahrens besteht darin, die oben durchgeführte unitäre Transformation schrittweise durchzuführen. Wir führen also zunächst

$$U_1 = \exp(-\sigma_z \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (76)$$

$$= \cos(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) + i\sigma_z \sin(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (77)$$

und transformieren H mit dieser Transformation. Das liefert

$$H_1 = U_1 H U_1^\dagger = -\frac{\Delta}{2} U_1 \sigma_x U_1^\dagger + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{k \leq k_1} \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) - \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (78)$$

Im nächsten Schritt wird dann eine zweite Transformation

$$U_2 = \exp(-\sigma_z \sum_{k_1 \geq k > k_2} \frac{\lambda_k}{2\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \quad (79)$$

durchgeführt u.s.f.. Dabei wählen wir k_1 so, daß $\omega_1 = \omega_{k_1}$ groß verglichen mit Δ ist, damit z.B. bei einer störungstheoretischen Behandlung Nenner der Form $\omega - \Delta$ nicht zu klein werden.

Die Auswertung erfolgt ähnlich wie im vorangegangenen Abschnitt. Es gilt

$$U_1 \sigma_x U_1^\dagger = \cos(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sigma_x - \sin(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \sigma_y \quad (80)$$

und wir werten diesen Ausdruck aus, indem wir von den Faktoren, die die bosonischen Operatoren enthalten, Erwartungswerte bilden (nur bezüglich des Bades). Es gilt

$$\left\langle \cos(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \right\rangle = \Re \left\langle \exp(-\sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \right\rangle \quad (81)$$

$$\exp(-\sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) = \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k^2}{\omega_k^2}) \exp(\sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} b_k^\dagger) \exp(-\sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} b_k) \quad (82)$$

und damit

$$\left\langle \cos(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)) \right\rangle = \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k^2}{\omega_k^2}) \quad (83)$$

und analog

$$\left\langle \sin\left(i \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k}{\omega_k} (b_k - b_k^\dagger)\right) \right\rangle = 0 \quad (84)$$

Man erhält also in dieser Näherung

$$H_1 = -\frac{\Delta_1}{2} \sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{k \leq k_1} \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) - \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k^2}{4\omega_k} \quad (85)$$

mit

$$\Delta_1 = \Delta \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{k>k_1} \frac{\lambda_k^2}{\omega_k^2}\right) = \Delta \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{\omega_1}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)}{\omega^2}\right) \quad (86)$$

Die Frequenz ω_1 wählen wir $\omega_1 = a\Delta$ mit einem hinreichend großen $a > 1$. Diese Prozedur wird nun iteriert, man erhält

$$\Delta_2 = \Delta_1 \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{\omega_2}^{\omega_1} \frac{d\omega J(\omega)}{\omega^2}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{a\Delta_1}^{a\Delta} \frac{d\omega J(\omega)}{\omega^2}\right) \quad (87)$$

und nach n Schritten

$$\Delta_n = \Delta_{n-1} \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{a\Delta_{n-1}}^{a\Delta_{n-2}} \frac{d\omega J(\omega)}{\omega^2}\right) \quad (88)$$

Auf diese Weise erhält man eine monoton fallende Folge von $\Delta_n \geq 0$, die im Limes $n \rightarrow \infty$ entweder nach 0 oder nach $\Delta_\infty > 0$ konvergiert. Dabei gilt dann

$$\Delta_\infty = \Delta \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{a\Delta_\infty}^{\infty} \frac{d\omega J(\omega)}{\omega^2}\right) \quad (89)$$

Je nachdem, was für ein Bad vorliegt, erhält man unterschiedliche Resultate.

Δ_∞ ist eine Größe, die experimentell zugänglich ist und die für das dynamische Verhalten des Systems wichtig ist. Dagegen ist Δ in den meisten Fällen nicht zugänglich und für ω_c gibt es nur plausible Annahmen für die Größenordnung. Über die näherungsweise Abbildung von H auf H_∞ wird also ein realistisches Modell mit unbekanntem Parametern auf ein effektives Modell mit experimentell zugänglichen Parametern abgebildet.

3.3.1 Das Ohmsche Bad

Mit

$$J(\omega) = 2\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega) \quad (90)$$

ergibt sich

$$\Delta_\infty = \Delta \exp(-\alpha \ln(\omega_c/(a\Delta_\infty))) = \Delta \left(\frac{a\Delta_\infty}{\omega_c}\right)^\alpha \quad (91)$$

und damit

$$\Delta_\infty = \Delta \left(\frac{a\Delta}{\omega_c}\right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} > 0 \quad (92)$$

falls $\alpha < 1$. Für $\alpha \geq 1$ gilt $\Delta_\infty = 0$. Dieses Resultat ist Es gibt also einen Übergang: Für schwache Kopplung erhält man einen effektiven, renormierten Hamiltonoperator

$$H_\infty = -\frac{\Delta_\infty}{2} \sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{k:\omega_k < a\Delta_\infty} \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) - \frac{\alpha}{2} (\omega_c - a\Delta_\infty) \quad (93)$$

der von der gleichen Form wie der ursprüngliche Hamiltonoperator ist, aber nur noch eine Energieskala Δ_∞ enthält. Dieser Hamiltonoperator beschreibt ein tunnelndes Teilchen mit einem effektiven Tunnelmatrixelement Δ_∞ . Im anderen Fall ($\alpha > 1$, starke Kopplung) erhält man

$$H_\infty = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k - \frac{\alpha}{2} \omega_c \quad (94)$$

Dieser Hamiltonoperator hat einen entarteten Grundzustand: $\sigma_z = \pm 1$ ist eine gute Quantenzahl. Das Teilchen tunnelt nicht mehr, sondern ist in den beiden Zuständen $\sigma_z = 1$ (rechts) oder $\sigma_z = -1$ (links) lokalisiert. Zu bemerken ist, daß der genaue Wert von α , bei dem der Übergang passiert, sicher nicht zuverlässig aus dieser Rechnung zu bestimmen ist. Dieser Wert könnte auch größer als 1 .

Der Parameter a , der eingeführt wurde, spielt für das qualitative Resultat keine Rolle, er beeinflusst lediglich die Größe von Δ_∞ .

3.3.2 Das super-Ohmsche Bad

In diesem Fall ist

$$J(\omega) = K \omega^s \theta(\omega_c - \omega) \quad (95)$$

mit $s > 1$. Damit gilt

$$\Delta_\infty = \Delta \exp\left(-\frac{K}{2(s-1)}(\omega_c^{s-1} - (a\Delta_\infty)^{s-1})\right) > \Delta \exp\left(-\frac{K}{2(s-1)}\omega_c^{s-1}\right) > 0 \quad (96)$$

In diesem Fall erhält man also immer einen effektiven Tunnel-Hamiltonoperator, Lokalisierung tritt nicht auf. Zumindest für große ω_c spielt außerdem der Parameter a keine Rolle.

3.3.3 Das sub-Ohmsche Bad

In diesem Fall ist

$$J(\omega) = K \omega^s \theta(\omega_c - \omega) \quad (97)$$

mit $s < 1$. Damit gilt

$$\Delta_\infty = \Delta \exp\left(-\frac{K}{2(s-1)}(\omega_c^{s-1} - (a\Delta_\infty)^{s-1})\right) \quad (98)$$

In diesem Fall kann man den Limes $\omega_c \rightarrow \infty$ durchführen. Als Bedingung erhält man dann

$$\Delta_\infty = \Delta \exp\left(-\frac{K}{2(1-s)}(a\Delta_\infty)^{s-1}\right) \quad (99)$$

mit der einzigen Lösung $\Delta_\infty = 0$. Danach tritt also immer Lokalisierung auf. Allerdings ist zu bemerken, daß in diesem Fall (wie auch im Ohmschen Fall) die Lösung aufgrund der Näherungen eventuell nicht zuverlässig ist, so daß, wenn zusätzliche Kopplungen in $U_n \sigma_x U_n^\dagger$ mitgenommen werden, doch ein Übergang auftritt und das Teilchen erst bei größerem K lokalisiert. Die Lösung $\Delta_\infty = 0$ ist im übrigen die einzige Lösung, die unabhängig von a ist.

3.4 Flußgleichungen

Anstelle von schrittweisen unitären Transformationen kann man eine kontinuierliche unitäre Transformation durchführen. Damit ist es möglich, Näherungen besser zu kontrollieren. Anstelle einer Folge (näherungsweise) unitär äquivalenter Hamiltonoperatoren $H_n = U_n H_{n-1} U_n^\dagger$ hat man dann eine kontinuierliche Darstellung

$$H(\ell + d\ell) = \exp(\eta(\ell)d\ell)H(\ell)\exp(-\eta(\ell)d\ell) \quad (100)$$

Damit die infinitesimale Transformation $\exp(\eta(\ell)d\ell)$ unitär ist, muß $\eta(\ell)$ antihermitesch sein,

$$\eta(\ell) = -\eta(\ell)^\dagger \quad (101)$$

Da $d\ell$ infinitesimal ist, kann man die exp-Funktion entwickeln und erhält

$$\frac{dH}{d\ell} = [\eta, H] \quad (102)$$

Man sieht sofort, daß eine solche kontinuierliche unitäre Transformation eine Verallgemeinerung des Konzepts der schrittweisen unitären Transformationen aus dem letzten Abschnitt ist. Dazu muß man $\eta(\ell)$ nur stückweise konstant wählen.

Die Methode wurde 1994 von Franz Wegner und unabhängig von K. Wilson vorgeschlagen. Sie wurde sehr erfolgreich auf eine große Klasse von Systemen angewandt, einen Überblick dazu vermitteln die WWW-Seiten <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~statphys/floweq.html> am Institut für Theoretische Physik der Universität Heidelberg. Arbeiten zu dissipativen Quantensystemen, in denen diese Methode angewandt wurde, finden Sie auf meinen WWW-Seiten <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/floweq.html> zu diesem Thema.

3.4.1 Bemerkungen zur Methode

Ein großer Vorteil dieser Methode ist, daß man je nach Zielsetzung unterschiedliche Erzeugende η für die Transformation wählen kann. In vielen Fällen wird man versuchen, den Hamiltonoperator (näherungsweise) zu diagonalisieren oder zu blockdiagonalisieren. Eine mögliche und in vielen Fällen sinnvolle Wahl von η , die den Hamiltonoperator (nahezu) diagonalisiert, ist

$$\eta = [H_d, H] \quad (103)$$

wobei H_d der (geeignet gewählte) Diagonalteil des Hamiltonoperators ist. Um zu illustrieren, warum diese Wahl von η sinnvoll ist, führen wir die Rechnung für eine reelle, symmetrische Matrix durch. Sei

$$H = (h_{n,m})_{n,m=1,\dots,N} \quad (104)$$

$$H_d = (h_{n,n}\delta_{n,m})_{n,m=1,\dots,N} \quad (105)$$

$$\eta = (\eta_{n,m})_{n,m=1,\dots,N} \quad (106)$$

mit

$$\eta_{n,m} = (h_{n,n} - h_{m,m})h_{n,m} \quad (107)$$

Dann gilt

$$\frac{dh_{n,m}}{d\ell} = \sum_r (\eta_{n,r}h_{r,m} - h_{n,r}\eta_{r,m}) \quad (108)$$

$$= -(h_{n,n} - h_{m,m})^2 h_{n,m} + \sum_{r \neq n,m} (h_{n,n} + h_{m,m} - 2h_{r,r})h_{n,r}h_{r,m} \quad (109)$$

Es gilt

$$\frac{d}{d\ell} \sum_{n \neq m} h_{n,m}^2 = -\frac{d}{d\ell} \sum_n h_{n,n}^2 \quad (110)$$

$$= -2 \sum_{n,m} (h_{n,n} - h_{m,m})^2 h_{n,m} h_{m,n} < 0 \quad (111)$$

$\sum_{n \neq m} h_{n,m}^2$ fällt also monoton, so daß für $\ell \rightarrow \infty$ die Größen

$$(h_{n,n} - h_{m,m}) h_{n,m} \quad (112)$$

verschwinden. Abgesehen von Entartungen ($h_{n,n}(\infty) = h_{m,m}(\infty)$) verschwinden also die Diagonalmatrixelemente $h_{n,m}$.

3.4.2 Transformation des Hamiltonoperators

Wir haben oben schon gesehen, daß eine unitäre Transformation zusätzlich zu den im Hamiltonoperator schon vorhandenen Termen noch weitere erzeugt, die wir oben nur im Rahmen einer einfachen Näherung berücksichtigt haben. Insbesondere treten Terme auf, die σ_y enthalten. Wir machen deshalb für den ℓ -abhängigen Hamiltonoperator zunächst den Ansatz

$$H = -\frac{\Delta}{2} \sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sigma_z \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) - \frac{i}{2} \sigma_y \sum_k \xi_k (b_k - b_k^\dagger) + E_0 \quad (113)$$

Alle Parameter hängen jetzt von ℓ ab. Für $\ell = 0$ soll der Hamiltonoperator der ursprüngliche sein, es gilt also insbesondere $\xi_k(\ell = 0) = 0$ und $E_0(\ell = 0) = 0$. Wir werden sehen, daß im Prinzip weitere Terme im Hamiltonoperator zu berücksichtigen sind, die wir aber zunächst weglassen. Wählt man

$$H_d = -\frac{\Delta}{2} \sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k \quad (114)$$

so erhält man eine Erzeugende der Form

$$\eta = \frac{1}{2} \sigma_z \sum_k \eta_{k,z} (b_k - b_k^\dagger) + \frac{i}{2} \sigma_y \sum_k \eta_{k,y} (b_k + b_k^\dagger) \quad (115)$$

mit reellen Parametern $\eta_{k,x/y}$. Mit dieser Erzeugenden ergibt sich

$$[\eta, H] = \frac{1}{2} \sigma_z \sum_k (\eta_{k,z} \omega_k - \eta_{k,y} \Delta) (b_k + b_k^\dagger) \quad (116)$$

$$+ \frac{i}{2} \sigma_y \sum_k (\eta_{k,y} \omega_k - \eta_{k,z} \Delta) (b_k - b_k^\dagger) \quad (117)$$

$$- \frac{1}{2} \sigma_x \sum_{k,k'} [\eta_{k,y} \lambda_{k'} : (b_k + b_k^\dagger) (b_{k'} + b_{k'}^\dagger) : \quad (118)$$

$$- \eta_{k,z} \xi_{k'} : (b_k - b_k^\dagger) (b_{k'} - b_{k'}^\dagger) :] \quad (119)$$

$$- \frac{1}{2} \sigma_x \sum_k (\eta_{k,y} \lambda_k + \eta_{k,z} \xi_k) (2n_k + 1) \quad (120)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_k (\eta_{k,y} \xi_k + \eta_{k,z} \lambda_k) \quad (121)$$

Die beiden Ausdrücke in der dritten und vierten Zeile wurden normalgeordnet, daraus ergibt sich der Beitrag in der fünften Zeile. Der Grund hierfür ist der folgende: Wir werden in einer ersten Näherung die Terme in der dritten und vierten Zeile vernachlässigen. Durch die Normalordnung ist garantiert, daß der Erwartungswert dieser Terme im Grundzustand verschwindet. Im fünften Term ist n_k die Besetzungszahl für Bosonen im Zustand k . Für $T = 0$ verschwindet n_k , für endliche T steht hier die Boseverteilung.

Aus dem Kommutator ergeben sich die folgenden Flußgleichungen für die Parameter

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = \omega_k \eta_{k,z} - \Delta \eta_{k,y} \quad (122)$$

$$\frac{d\xi_k}{d\ell} = -\omega_k \eta_{k,y} + \Delta \eta_{k,z} \quad (123)$$

$$\frac{d\Delta}{d\ell} = \sum_k (\eta_{k,y} \lambda_k + \eta_{k,z} \xi_k) (2n_k + 1) \quad (124)$$

$$\frac{dE_0}{d\ell} = -\frac{1}{2} \sum_k (\eta_{k,y} \xi_k + \eta_{k,z} \lambda_k) \quad (125)$$

Würde man $\eta = [H_d, H]$ wählen, dann lieferten diese Flußgleichungen für $\ell \rightarrow \infty$ verschwindende λ_k, ξ_k . Der Nachteil ist aber, daß ξ_k erzeugt wird, während dieser Parameter im ursprünglichen Hamiltonoperator nicht auftritt. Wir können aber die Freiheit in der Wahl von η nutzen und η so wählen, daß

$$\frac{d\xi_k}{d\ell} = 0 \quad (126)$$

Damit gilt

$$\eta_{k,y} = \frac{\Delta}{\omega_k} \eta_{k,z} \quad (127)$$

und

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = -\frac{(\omega_k^2 - \Delta^2)}{\omega_k} \eta_{k,z} \quad (128)$$

Mit

$$\eta_{k,z} = \omega_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \lambda_k f_k \quad (129)$$

wobei $f_k > 0$ gelten soll, erhält man

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = -(\omega_k - \Delta)^2 f_k \lambda_k < 0 \quad (130)$$

so daß die λ_k monoton fallen und zumindest für $\omega_k \neq \Delta$ ($\ell = \infty$) im Limes $\ell \rightarrow \infty$ verschwinden. Für die weiteren Flußgleichungen erhält man mit dieser Wahl von η

$$\xi_k = 0 \quad (131)$$

$$\frac{d\Delta}{d\ell} = -\Delta \sum_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} (2n_k + 1) f_k \lambda_k^2 \quad (132)$$

$$\frac{dE_0}{d\ell} = -\frac{1}{2} \sum_k \omega_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} f_k \lambda_k^2 \quad (133)$$

3.4.3 Lösung der Gleichungen

Wie oben setzen wir

$$J(\omega, \ell) = \sum_k \lambda_k^2 \delta(\omega - \omega_k) \quad (134)$$

und $f_k = 1$. Damit gilt

$$J(\omega, \ell) = J(\omega, 0) \exp\left(-2 \int_0^\ell (\omega - \Delta(\ell'))^2 d\ell'\right) \quad (135)$$

und

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} = - \int_0^\infty d\omega J(\omega, 0) \coth(\beta\omega/2) \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta} \quad (136)$$

$$\times \exp\left(-2 \int_0^\ell (\omega - \Delta(\ell'))^2 d\ell'\right) \quad (137)$$

Diese Gleichung kann zum einen numerisch gelöst werden (siehe [4]), zum anderen kann man aber auch sehr gut analytische Näherungsergebnisse erhalten.

Untersuchen wir zunächst die Asymptotik der Gleichungen. Ich setze dazu

$$\bar{\Delta}(\ell) = \frac{1}{\ell} \int_0^\ell \Delta(\ell') d\ell' \quad (138)$$

und werte das Integral über ω in der Sattelpunktnäherung aus. Das Maximum des Integranden bestimmt man aus

$$-4(\omega - \bar{\Delta})\ell + \frac{1}{\omega - \Delta} - \frac{1}{\omega + \Delta} + \frac{J'(\omega, 0)}{J(\omega, 0)} - \frac{2}{\sinh(\beta\omega)} = 0 \quad (139)$$

Die ersten beiden Terme sind die wesentlichen, die anderen liefern nur kleine Korrekturen. Aus den ersten beiden Termen erhält man

$$\omega_m = \frac{\Delta + \bar{\Delta}}{2} + \sqrt{\frac{(\Delta - \bar{\Delta})^2}{4} + \frac{1}{4\ell}} \quad (140)$$

und als Näherung für große ℓ

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} = - \sqrt{\frac{2\pi}{4\ell + \frac{1}{(\omega_m - \Delta)^2}}} J(\omega_m, 0) \coth(\beta\omega_m/2) \frac{\omega_m - \Delta}{\omega_m + \Delta} \exp\left(-2 \int_0^\ell (\omega_m - \Delta(\ell'))^2 d\ell'\right) \quad (141)$$

Es liegt nahe, für das asymptotische Verhalten einen Ansatz

$$\Delta = \Delta_\infty + \frac{c}{\ell^a} \quad (142)$$

zu machen. Wir machen folgende Fallunterscheidung:

$1 > a > \frac{1}{2}$: In diesem Fall gilt

$$\bar{\Delta} - \Delta = \frac{ca}{1-a} \frac{1}{\ell^a} + O\left(\frac{1}{\ell}\right) \quad (143)$$

$$\omega_m = \Delta + \frac{\bar{\Delta} - \Delta}{2} + \sqrt{\frac{(\bar{\Delta} - \Delta)^2}{4} + \frac{1}{4\ell}} \quad (144)$$

$$= \bar{\Delta} + O\left(\frac{1}{\ell}\right) \quad (145)$$

$$= \Delta_\infty + \frac{c}{1-a} \frac{1}{\ell^a} \quad (146)$$

$$\int_0^\ell (\omega_m - \Delta)^2 d\ell' \approx C_1 - \frac{c^2 a^2}{(1-a)^2(1-2a)} \ell^{1-2a} \quad (147)$$

wobei

$$C_1 = \int_0^\infty (\omega_m - \Delta)^2 d\ell \quad (148)$$

Damit findet man

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} \propto \ell^{-2a} \quad (149)$$

im Widerspruch zu der Annahme. Die rechte Seite fällt zu langsam ab. Ein entsprechendes Resultat erhält man für einen noch schnelleren Abfall von $\Delta - \Delta_\infty$.

$a < \frac{1}{2}$: Die Beziehungen für $\bar{\Delta} - \Delta$ und ω_m gelten weiterhin, aber

$$\int_0^\ell (\omega_m - \Delta)^2 d\ell' \approx \frac{c^2 a^2}{(1-a)^2(1-2a)} \ell^{1-2a} \quad (150)$$

Damit erhält man

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} \propto \ell^{-2a} \exp\left(-\frac{2c^2 a^2}{(1-a)^2(1-2a)} \ell^{1-2a}\right) \quad (151)$$

was wiederum im Widerspruch zur Annahme steht, dieses Mal fällt die rechte Seite zu schnell ab.

$a = \frac{1}{2}$: Jetzt gilt

$$\bar{\Delta} - \Delta = \frac{c}{\sqrt{\ell}} + O\left(\frac{1}{\ell}\right) \quad (152)$$

$$\omega_m = \Delta + \frac{\bar{\Delta} - \Delta}{2} + \sqrt{\frac{(\bar{\Delta} - \Delta)^2}{4} + \frac{1}{4\ell}} \quad (153)$$

$$= \bar{\Delta} + O\left(\frac{1}{\ell}\right) \quad (154)$$

$$= \Delta_\infty + \frac{2c}{\sqrt{\ell}} \quad (155)$$

$$\int_0^\ell (\omega_m - \Delta)^2 d\ell' \approx C_1(\ell_0) + c^2 \ln(\ell/\ell_0) \quad (156)$$

und damit

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} \propto \ell^{-1-2c^2} \quad (157)$$

Das ist konsistent mit der Annahme falls

$$c = \frac{1}{2} \quad (158)$$

Als einzige konsistente Lösung erhalten wir also

$$\Delta = \Delta_\infty + \frac{1}{2\sqrt{\ell}} \quad (159)$$

Eine Erweiterung des Ansatzes zeigt, daß zu diesem Verhalten noch logarithmische Korrekturen hinzukommen können. Diese Asymptotik gilt natürlich nur dann, wenn $\Delta_\infty > 0$.

Eine einfache, selbstkonsistente Gleichung zur Bestimmung von Δ_∞ erhält man, wenn man in der Flußgleichung

$$\frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\ell} = - \int_0^\infty d\omega J(\omega, 0) \coth(\beta\omega/2) \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta} \quad (160)$$

$$\times \exp\left(-2 \int_0^\ell (\omega - \Delta(\ell'))^2 d\ell'\right) \quad (161)$$

auf der rechten Seite Δ durch Δ_∞ ersetzt und die Integration über ℓ ausführt. Man erhält dann

$$\ln \frac{\Delta_\infty}{\Delta(0)} \approx -\frac{1}{2} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega, 0) \coth(\beta\omega/2)}{\omega^2 - \Delta_\infty^2} = -\frac{K}{2} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^s \coth(\beta\omega/2)}{\omega^2 - \Delta_\infty^2} \quad (162)$$

wobei das Integral auf der rechten Seite als Hauptwert zu interpretieren ist.

$s = 1$: Für das Ohmsche Bad und $T = 0$ findet man mit $K = 2\alpha$

$$\ln \frac{\Delta_\infty}{\Delta(0)} = -\frac{\alpha}{2} \ln \left| \frac{\omega_c^2 - \Delta_\infty^2}{\Delta_\infty^2} \right| \quad (163)$$

und damit für $\omega_c \gg \Delta_\infty$

$$\Delta_\infty = \Delta(0) \left(\frac{\Delta(0)}{\omega_c} \right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \quad (164)$$

Für endliche Temperaturen kann man die Gleichung entweder numerisch lösen, oder man verwendet für eine einfache analytische Abschätzung $\coth(x) \approx 1/x$ für $x < 1$, $\coth(x) \approx 1$ für $x \geq 1$. Damit erhält man einen Übergang bei endlichen T , bei dem Δ_∞ verschwindet [4]. Dieser Übergang ist ein Übergang zwischen kohärentem Tunneln bei tiefen Temperaturen zu einem inkohärenten Verhalten bei höheren Temperaturen,

$s > 1$: In diesem Fall erhält man für $T = 0$ das schon bekannte Resultat

$$\Delta_\infty = \Delta(0) \exp\left(-\frac{1}{2(s-1)} \frac{\omega_c^{s-1}}{K^{s-1}}\right) \quad (165)$$

$s < 1$: Wir beschränken uns auf $T = 0$. Da das Integral nicht UV-divergent ist, kann man den Limes $\omega_c \rightarrow \infty$ bilden und erhält

$$\frac{\Delta_\infty}{\Delta(0)} = \exp\left(-\frac{\pi}{4} \left(\frac{\Delta_\infty}{K}\right)^{s-1} \cot\left(\frac{1}{2}\pi(1-s)\right)\right) \quad (166)$$

Diese Gleichung liefert für

$$\Delta_0 > K \left(\frac{4 \tan(\frac{1}{2}\pi(1-s))}{e\pi(1-s)} \right)^{1/(s-1)} \quad (167)$$

eine Lösung mit

$$\Delta_\infty > K \left(\frac{4 \tan(\frac{1}{2}\pi(1-s))}{\pi(1-s)} \right)^{1/(s-1)} \quad (168)$$

Im Gegensatz zur adiabatischen Renormierung liefern die Flußgleichungen also einen Übergang, der aber nicht wie im Ohmschen Fall kontinuierlich sondern diskontinuierlich ist.

3.4.4 Transformation der Observablen

Wir haben eine unitäre Transformation des Hamiltonoperators durchgeführt. Wenn wir Erwartungswerte von Observablen bestimmen wollen, müssen wir die Observablen der gleichen unitären Transformation unterwerfen. Wie hierzu vorzugehen ist, wird in diesem Abschnitt erläutert.

$$\frac{d\sigma_z(\ell)}{d\ell} = [\eta(\ell), \sigma_z(\ell)], \quad \sigma_z(\ell = 0) = \sigma_z. \quad (169)$$

Diese Differentialgleichung kann, ebenso wie die für den Hamiltonoperator, nicht explizit gelöst werden. Wir machen deshalb den folgenden Ansatz für $\sigma_z(\ell)$

$$\sigma_z(\ell) = h(\ell)\sigma_z + \sigma_x \sum_k \chi_k(\ell)(b_k + b_k^\dagger) \quad (170)$$

Damit erhält man

$$[\eta, \sigma_z(\ell)] = -\sigma_x h \sum_k \eta_{ky}(b_k + b_k^\dagger) \quad (171)$$

$$+ \frac{i}{2} \sigma_y \sum_{k,k'} \eta_{kz} \chi_{k'} [(b_k - b_k^\dagger), (b_{k'} + b_{k'}^\dagger)]_+ \quad (172)$$

$$+ \sigma_z \sum_{k,k'} \eta_{ky} \chi_{k'} (b_k + b_k^\dagger)(b_{k'} + b_{k'}^\dagger) \quad (173)$$

$$= -\sigma_x h \sum_k \eta_{ky}(b_k + b_k^\dagger) \quad (174)$$

$$+ \frac{i}{2} \sigma_y \sum_{k,k'} \eta_{kz} \chi_{k'} : [(b_k - b_k^\dagger), (b_{k'} + b_{k'}^\dagger)]_+ : \quad (175)$$

$$+ \sigma_z \sum_{k,k'} \eta_{kz} \chi_{k'} : (b_k + b_k^\dagger)(b_{k'} + b_{k'}^\dagger) : \quad (176)$$

$$+ \sigma_z \sum_k \eta_{kz} \chi_k (2n_k + 1) \quad (177)$$

Wir vernachlässigen die normalgeordneten höheren Terme in der 5. und 6. Zeile. Damit erhält man die folgenden Differentialgleichungen

$$\frac{dh}{d\ell} = \sum_k \eta_{ky} \chi_k (2n_k + 1) \quad (178)$$

$$\frac{d\chi_k}{d\ell} = -\eta_{ky} h \quad (179)$$

mit den Anfangsbedingungen $h(0) = 1$, $\chi_k(0) = 0$. Hat man die Gleichungen gelöst, so erhält man

$$\sigma_z(\infty) = h(\infty)\sigma_z + \sigma_x \sum_k \chi_k(\infty)(b_k + b_k^\dagger) \quad (180)$$

Ohne die Gleichungen explizit zu lösen, sieht man, daß die Größe

$$h(\ell)^2 + \sum_k (2n_k + 1) \chi_k^2 = 1 \quad (181)$$

eine Erhaltungsgröße ist. Die rechte Seite ergibt sich für $\ell = 0$. Diese Erhaltungsgröße hat eine einfache Bedeutung. Berechnet man $\sigma_z(\ell)^2$, so sieht man, daß dieser Operator nicht wie es sein sollte gleich 1 ist. Bildet man aber den Erwartungswert, so erhält man

$$\langle \sigma_z(\ell)^2 \rangle = h(\ell)^2 + \sum_k (2n_k + 1) \chi_k^2 = 1 \quad (182)$$

Zumindest der Erwartungswert liefert als das richtige Resultat. Die Interpretation dieses Resultats ist einfach: Wir haben Terme vernachlässigt, die normalgeordnet sind, deren Erwartungswert also verschwindet. Daher sollten die Resultate bei niedrigen Energien gut sein, also in der Nähe des Grundzustands.

In der Heisenbergdarstellung gilt

$$\sigma_z(\infty, t) = \exp(iH(\infty)t) \sigma_z(\infty) \exp(-iH(\infty)t) \quad (183)$$

$$= h(\infty) \exp(i\Delta(\infty)t) \sigma_z + \sigma_x \sum_k \chi_k(\infty) (b_k \exp(-i\omega_k t) + b_k^\dagger \exp(i\omega_k t)) \quad (184)$$

Berechnet man die Korrelationsfunktion

$$\hat{C}(t) = \langle [\sigma_z(\infty, t), \sigma_z(\infty, 0)]_+ \rangle \quad (185)$$

so erhält man

$$\hat{C}(t) = \int_0^\infty dt \cos(\omega t) C(\omega) \quad (186)$$

mit

$$C(\omega) = h(\infty)^2 \delta(\omega - \Delta(\infty)) + \sum_k \chi_k(\infty)^2 (2n_k + 1) \delta(\omega - \omega_k) \quad (187)$$

Aufgrund der Erhaltungsgröße gilt

$$\int d\omega C(\omega) = 1 \quad (188)$$

Setzt man η_{ky} in die Flußgleichungen ein, so erhält man

$$\frac{dh}{d\ell} = -\Delta \sum_k \lambda_k \chi_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \coth \frac{\beta \omega_k}{2} \quad (189)$$

$$\frac{d\chi_k}{d\ell} = \Delta h \lambda_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \quad (190)$$

Wir beschränken uns in der folgenden Diskussion auf den Fall $T = 0$. Mit

$$\tilde{f}(\omega, \ell) = \Delta \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta} \exp \left(- \int_0^\ell d\ell'' (\omega - \Delta)^2 \right) \quad (191)$$

gilt

$$\chi_k(\ell) = \lambda_k(0) \int_0^\ell d\ell' h f(\omega_k, \ell') \quad (192)$$

Damit findet man

$$C(\omega) = h(\infty)^2 \delta(\omega - \Delta_\infty) + J(\omega, 0) \left(\int_0^\infty d\ell h(\ell) \tilde{f}(\omega, \ell) \right)^2 \quad (193)$$

Nehmen wir an, daß $\Delta_\infty > 0$. Dann ist das Integral in der Klammer für ω in der Nähe von Δ_∞ proportional zu $(\omega - \Delta_\infty)^{-1}$ und wir erhalten einen Widerspruch zu der Summenregel. Also muß $h(\ell) \rightarrow_{\ell \rightarrow \infty} 0$ gelten.

Damit erhält man sofort, daß das Verhalten von $C(\omega)$ für kleine ω durch $C(\omega) \propto J(\omega, 0) \propto \omega^s$ gegeben ist. Damit erhält man

$$\hat{C}(t) \propto t^{-s-1} \quad (194)$$

für lange Zeiten t . Dieses Resultat ist exakt [3].

Wenn dagegen $\Delta(\ell) \rightarrow_{\ell \rightarrow \infty} 0$ (also im Ohmschen oder im sub-Ohmschen Fall für jeweils hinreichend starke Kopplung), dann wird die rechte Seite in der Differentialgleichung für h schneller abfallen und man erhält einen endlichen Wert für $h(\infty)$ [4].

Zusammenfassend liefern die Flußgleichungen als bei niedrigen Energien (entspricht langen Zeiten) das korrekte Ergebnis.

Wir betrachten jetzt die Lösung der Gleichungen bei mittleren Frequenzen. Dazu ist zunächst folgendes zu beachten: $\Delta(\ell)$ fällt als Funktion von ℓ sehr schnell auf Werte $\propto \Delta_\infty$ ab, während sich $h(\ell)$ nur sehr langsam verändert. Ersetzt man deshalb zunächst als sehr einfache Näherung in dem Ausdruck für $\tilde{f}(\omega, \ell)$ die Größe $\Delta(\ell)$ durch Δ_∞ und $h(\ell)$ in dem Integral in dem Ausdruck für $C(\omega)$ durch 1, dann erhält man

$$C(\omega) = J(\omega, 0) \frac{\Delta_\infty^2}{(\omega^2 - \Delta_\infty^2)^2} \quad (195)$$

und damit eine Divergenz bei $\omega = \Delta_\infty$. Dadurch, daß Δ von ℓ abhängt, wird diese Divergenz verschmiert und man erhält ein Maximum in $C(\omega)$ bei $\omega = \Delta_\infty$. Andererseits tritt aber folgendes Problem auf: $\tilde{f}(\omega, \ell)$ ist negativ für kleine ω und positiv für große ω . Diese Eigenschaft gilt auch für χ_k . Deshalb wird $C(\omega)$ als Funktion von ω eine Nullstelle in der Nähe von Δ_∞ haben. Diese Nullstelle ist die Konsequenz von der Näherung, die wir gemacht haben, als wir die Flußgleichungen für h und χ_k hergeleitet haben. Sie ist nicht physikalisch! Wenn wir also gute Ergebnisse für die Korrelationsfunktion bei mittleren Frequenzen haben wollen, müssen wir die Näherung an dieser Stelle verbessern. Das ist tatsächlich möglich [5, 6], erfordert aber einen großen zusätzlichen Rechenaufwand und würde den Rahmen der Vorlesung sprengen. Ich skizziere daher hier nur kurz die Vorgehensweise und stelle dann die Resultate vor.

Die Grundidee der Rechnung ist, daß sich ein Zwei-Niveau-System von einem harmonischen Oszillator nur durch die höheren Energieniveaus unterscheidet und das physikalische Verhalten dieser beiden Systeme bei sehr tiefen Temperaturen und nicht zu starker Kopplung an die Umgebung ähnlich sein sollte. Der dissipative harmonische Oszillator läßt sich mit Hilfe von Flußgleichungen exakt lösen (natürlich auch mit anderen Methoden). Wir modifizieren deshalb η so, daß es die gleiche Form wie für den dissipativen harmonischen Oszillator hat. Zu der vorherigen Form von η wird deshalb ein Term der Form

$$\sum_{k,q} \eta_{k,q} : (b_k + b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : \quad (196)$$

addiert. Die Koeffizienten $\eta_{k,q}$ werden so gewählt, daß normalgeordnete, quadratische Terme in den bosonischen Operatoren nicht in $H(\ell)$ auftreten. Für die Flußgleichungen für $\Delta(\ell)$ und $J(\omega, \ell)$ führt das zu einer kleinen Änderung, in den Gleichungen für h und χ_k taucht in der Gleichung für χ_k ein weiterer Term auf.

$$\frac{d\Delta}{d\ell} = -\Delta \int d\omega J(\omega, \ell) \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta} \coth \frac{\beta\omega}{2}, \quad (197)$$

$$\frac{\partial J(\omega, \ell)}{\partial \ell} = -2(\omega - \Delta)^2 J(\omega, \ell) + 2\Delta \tanh \frac{\beta\Delta}{2} J(\omega, \ell) \quad (198)$$

$$\times \int d\omega' \frac{\omega' J(\omega', \ell)}{\omega^2 - \omega'^2} \left(\frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta} + \frac{\omega' - \Delta}{\omega' + \Delta} \right) \quad (199)$$

$$\frac{dh}{d\ell} = -\Delta \sum_k \lambda_k \chi_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \coth \frac{\beta \omega_k}{2} \quad (200)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_k}{d\ell} &= \Delta h \lambda_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \Delta \lambda_k \tanh \frac{\beta \Delta}{2} \\ &\times \sum_q \frac{\chi_q \lambda_q \omega_q}{\omega_k^2 - \omega_q^2} \left(\frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \frac{\omega_q - \Delta}{\omega_q + \Delta} \right). \end{aligned} \quad (201)$$

Diese Gleichungen löst man wie folgt: Das asymptotische Verhalten der Gleichungen ist exakt bekannt, es ergibt sich aus der Analogie zum dissipativen harmonischen Oszillator. Man kann diese Gleichungen also für kleine ℓ numerisch lösen und für größere ℓ die Asymptotik verwenden. Dieses Verfahren liefert sehr gute Resultate für $C(\omega)$ für das super Ohmsche Bad ($s > 1$), die Fehler liegen unter 1%. Für das Ohmsche Bad erhält man nur für schwache Kopplung gute Resultate. Die folgenden Diagramme zeigen typische Ergebnisse. Sie stammen aus [5].

Fig. 4 zeigt Resultate für $C(\omega)$ und $S(\omega) = C(\omega)/J(\omega)$ für das Ohmsche Bad mit $\alpha = 0.1$, $\omega_c = 10\Delta_0$. Zum Vergleich wird eine andere Näherung (NIBA, wird häufig verwendet und soll gemeinhin gute Resultate liefern, versagt aber bei niedrigen Frequenzen) gezeigt.

Fig. 5 zeigt die Unabhängigkeit der Resultate von ω_c , wiederum für das Ohmsche Bad mit $\alpha = 0.1$.

Fig. 6 zeigt Resultate für ein super-Ohmsches Bad mit $s = 2$, $K = 5\Delta_0$ und $\omega_c = 10\Delta_0$.

4 Das Kondoprobem

Wenn man eine geringe Konzentration von magnetischen Störstellen (z.B. Übergangsmetallionen) in einem Metall hat, ergeben sich eine Reihe anomaler Eigenschaften. Zum Beispiel zeigt die Leitfähigkeit ein charakteristisches Minimum bei einer speziellen Temperatur T_K . Kondo hat als erster eine Erklärung für dieses Problem geliefert, daher hat sich die Bezeichnung Kondoprobem eingebürgert. Einen sehr guten Überblick über die Physik des Kondoproblems liefert [7].

4.1 Das Anderson-Modell

Es gibt zwei Standardmodelle zur Beschreibung des Verhaltens einer magnetischen Störstelle in einem Festkörper. Die erste Möglichkeit besteht darin, ein einfaches, rein elektronisches Modell zu verwenden. Der Hamiltonoperator lautet dann

$$H = H_S + H_B + H_{SB}$$

mit

$$H_S = \epsilon_d \sum_m d_m^\dagger d_m + \frac{U}{2} \sum_{m \neq m'} d_m^\dagger d_{m'}^\dagger d_{m'} d_m$$

$$H_B = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

$$H_{SB} = \sum_{k,m,\sigma} [V_{k,m} d_m^\dagger c_{k\sigma} + \text{h.c.}]$$

Das Bad besteht in diesem Modell aus Leitungselektronen. Die Wechselwirkung der Leitungselektronen wird vernachlässigt bzw. auf Hartree-Fock-Niveau in den Einteilchenenergien ϵ_k berücksichtigt.

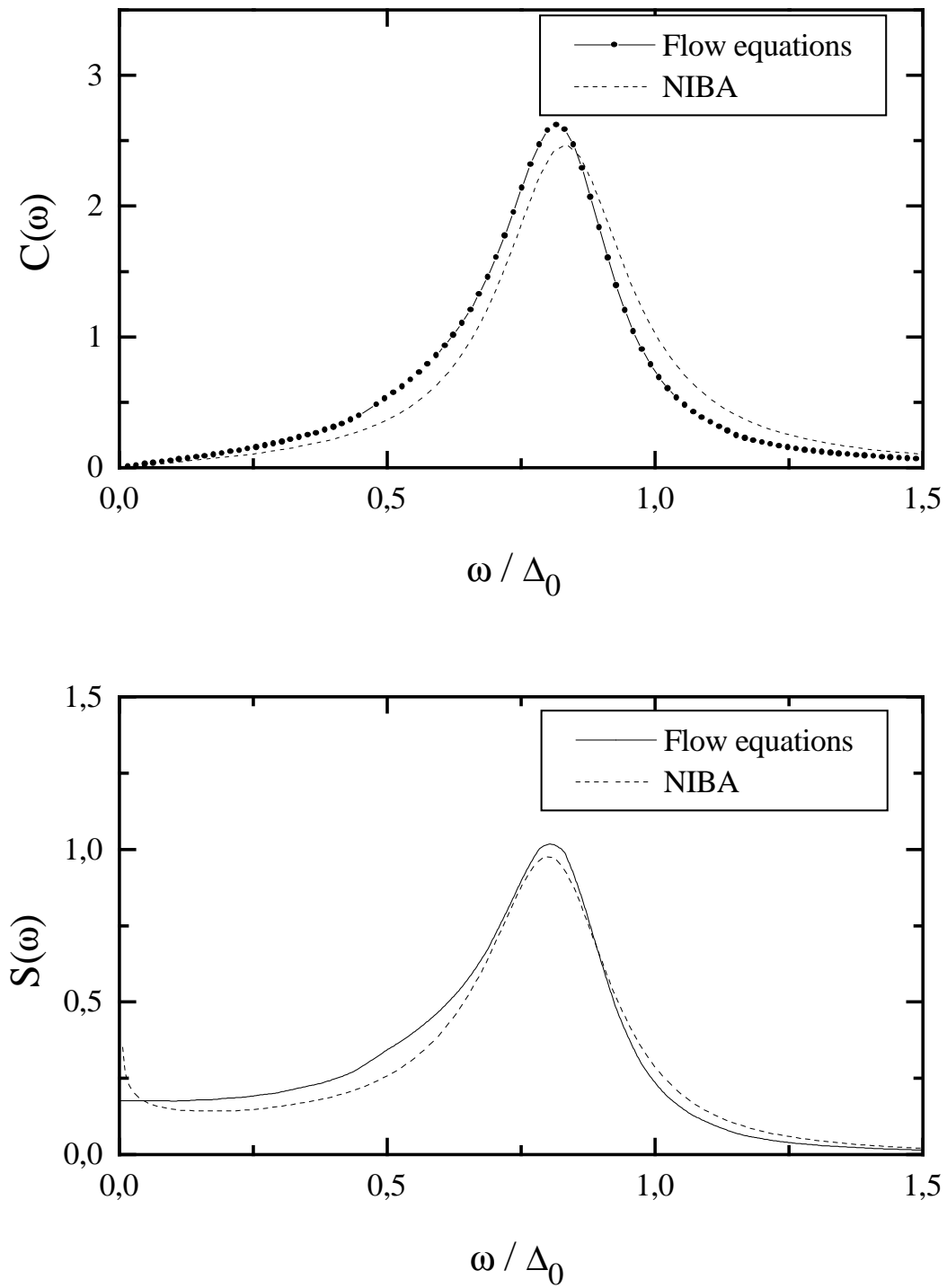


Figure 4

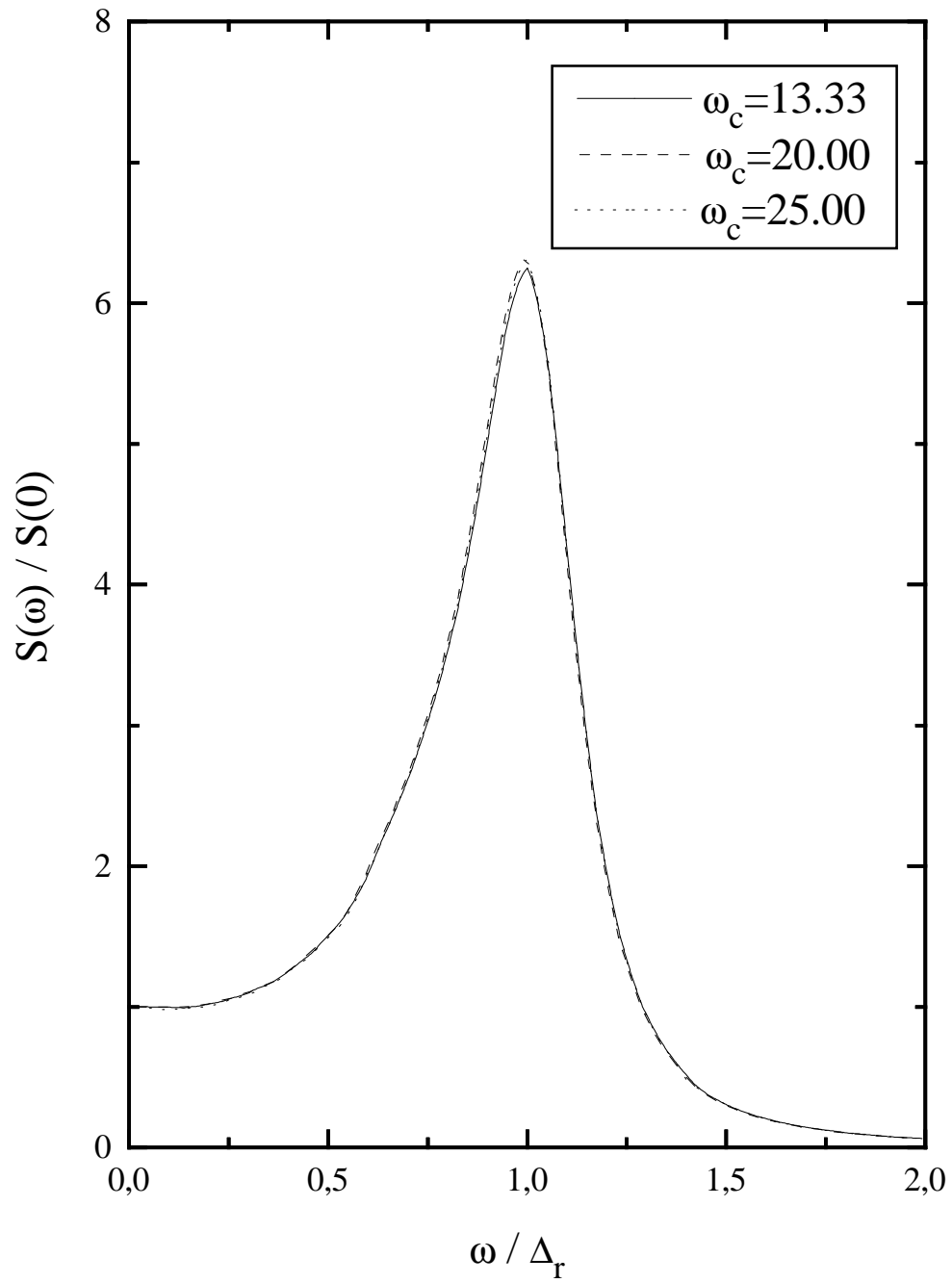


Figure 5

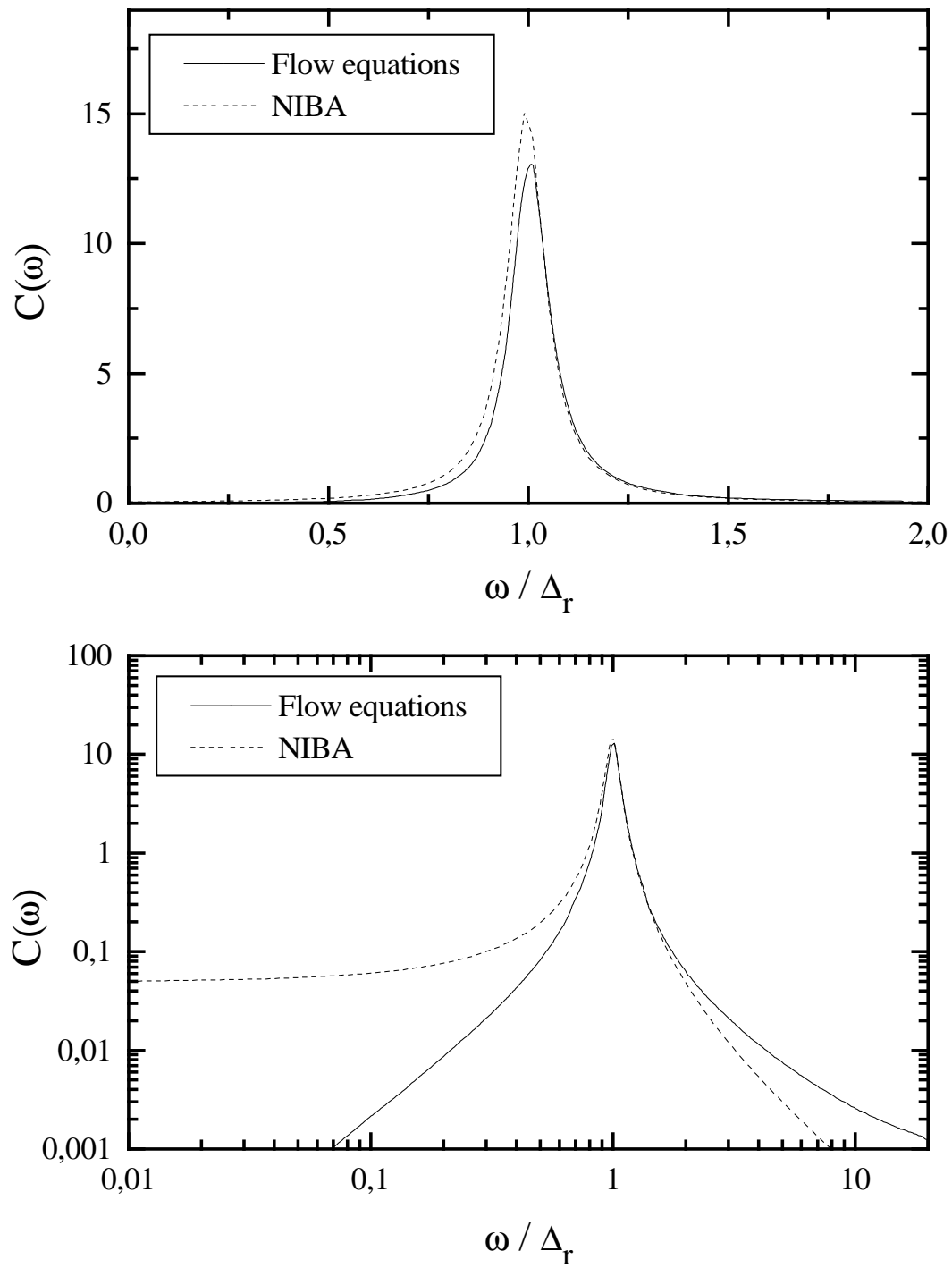


Figure 6

Das System besteht aus einer Störstelle, die ein entartetes Energieniveau ϵ_m enthält. Je nach physikalischer Situation kann m Spin- und Orbitalindices enthalten. Die räumliche Ausdehnung der Störstelle ist klein, deshalb muß die Coulombabstoßung von Elektronen auf der Störstelle berücksichtigt werden. Deshalb ist ein Wechselwirkungsterm in dem Modell enthalten.

Die Kopplung des Systems an das Bad geschieht durch eine Hybridisierung der Badzustände mit den Zuständen auf der Störstelle.

Das Modell kann etwas vereinfacht werden, ohne daß wesentliche physikalische Effekte verlorengehen. Wir nehmen im folgenden an, daß

1. die Indices k eindimensional sind,
2. der Index m ein Spinindex ist, den wir wie üblich mit σ notieren,
3. $V_{k,\sigma}$ nicht von σ abhängen, d.h. $V_{k,\sigma} = V_k$.

Um die Physik des Modells zu verstehen, nehmen wir zunächst an, daß ϵ_d unterhalb der Fermienergie liegt und U groß ist. Man hat also im Mittel ein Elektron auf der Störstelle. Wir betrachten zunächst den Fall ohne Hybridisierung und nehmen an, es gäbe nur einen Bandzustand. Dann sind folgende Situationen denkbar:

1. Der Bandzustand ist nicht oder doppelt besetzt, die Störstelle ist einfach besetzt. Der Zustand bildet ein Dublett.
2. Der Bandzustand und die Störstelle sind einfach besetzt und bilden ein Singulett.
3. Der Bandzustand und die Störstelle sind einfach besetzt und bilden ein Triplett.

Wenn man die Hybridisierung einschaltet, gibt es in diesen Fällen die folgenden Szenarien:

1. Bei dem doppelt besetzten Bandzustand kann ein Elektron von dem Bandzustand auf die Störstelle und wieder zurück springen. Der Zwischenzustand hat eine um $\epsilon_d + U$ höhere Energie, es ergibt sich also eine Energieverschiebung von der Größenordnung $V^2/(\epsilon_d + U)$, die für beide Dublett-zustände gleich ist. Für den leeren Bandzustand erhält man keine Energieverschiebung.
2. Im Fall des Singuletts kommt es ebenfalls zu einer Energieabsenkung, und zwar von der Größenordnung V^2/ϵ_d .
3. Das Triplett ändert seine Energie nicht.

Mit Hybridisierung wird es also zu einer Singulett-Bildung im Grundzustand kommen.

Mit diesen Überlegungen im Hinterkopf machen wir für den Grundzustand des Modells den Ansatz

$$\psi = \left(\alpha + \sum_{k,\sigma} \alpha(k) d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right) \psi_0$$

wobei ψ_0 der gefüllte Fermisee ist. Die Parameter α und $\alpha(k)$ werden so bestimmt, daß die Grundzustandsenergie

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle$$

minimal ist, wobei die Nebenbedingung

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

erfüllt sein muß. Die Nebenbedingung lautet

$$\alpha^2 + 2 \sum_k \alpha(k)^2 = 1$$

und für die Energie erhalten wir

$$E = E_0 + 2 \sum_{k: \epsilon_k \leq \epsilon_F} (\epsilon_d - \epsilon(k)) \alpha(k)^2 + 4\alpha \sum_k \alpha_k V_k$$

Wir bilden $L = E - \lambda(\alpha^2 + 2 \sum_k \alpha(k)^2 - 1)$ und berechnen $\frac{\partial L}{\partial \alpha} = 0$, $\frac{\partial L}{\partial \alpha_k} = 0$. Das liefert

$$\begin{aligned} -2\alpha\lambda + 4 \sum_k \alpha_k V_k &= 0 \\ -4\lambda\alpha + 4(\epsilon_d - \epsilon_k)\alpha_k + 4\alpha V_k &= 0 \end{aligned}$$

Die zweite Gleichung liefert

$$\alpha_k = \frac{\alpha V_k}{\lambda - \epsilon_d + \epsilon_k}$$

und eingesetzt in die erste Gleichung

$$-2\lambda\alpha - 4\alpha \sum_k \frac{V_k^2}{\lambda - \epsilon_d + \epsilon_k} = 0$$

Eine nicht triviale Lösung ($\alpha \neq 0$) erhält man für

$$\lambda = 2 \sum_k \frac{V_k^2}{\lambda - \epsilon_d + \epsilon_k}$$

Mit $\lambda = \epsilon_d + \epsilon$ gilt

$$E = E_0 + \epsilon_d + \epsilon$$

Die physikalische Bedeutung von ϵ ist also die einer Energieabsenkung durch die Singulettbildung. Nimmt man an, daß $V_k^2 \rho(\epsilon_k)$ in der Nähe der Fermikante konstant ist, wobei $\rho(\epsilon)$ die Zustandsdichte ist, dann findet man

$$\begin{aligned} \epsilon &= -\epsilon_d + 2V^2 \rho(0) \int_{-D}^0 \frac{d\epsilon'}{\epsilon + \epsilon'} \\ &\approx -\epsilon_d + 2V^2 \rho(0) \ln \frac{D}{|\epsilon|} \end{aligned}$$

Wir haben dabei die Fermienergie $\epsilon_F = 0$ gesetzt und eine untere Integrationsgrenze (z.B. die untere Bandkante oder eine andere effektive untere Grenze) $-D$ eingeführt. Für betragsmäßig kleine, negative ϵ findet man

$$\epsilon = -D \exp\left(-\frac{|\epsilon_d|}{2V^2 \rho(0)}\right)$$

Man erkennt deutlich den nicht-störungstheoretischen Charakter dieser Energieskala.

4.2 Das Kondomodell

In typischen Situationen ist die Wechselwirkung U auf der Störstelle im Andersonmodell groß und die Störstellenenergie ϵ_d liegt deutlich unter der Fermienergie. Die Störstelle ist also einfach besetzt. Von dieser Vorstellung sind wir auch bei der oben durchgeführten Variationsrechnung ausgegangen. In dieser Situation kann man versuchen, eine unitäre Transformation durchzuführen, die diejenigen Terme im Hamiltonoperator eliminiert, die die Anzahl der Elektronen auf der Störstelle verändern.

Man kann eine solche Transformation in einem Schritt durchführen [8] oder mittels einer kontinuierlichen Transformation [9].

4.2.1 Schrieffer-Wolff Transformation

Ausgangspunkt ist der Hamiltonoperator

$$H = \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow} + \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} [V_k d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \text{h.c.}]$$

Der Term, der die Anzahl der Elektronen auf der Störstelle ändert, ist der Hybridisierungsterm. Wir führen eine Transformation

$$H_{eff} = \exp(S) H \exp(-S) = H + [S, H] + \frac{1}{2}[S, [S, H]] + \dots$$

durch, wobei S so gewählt werden soll, daß in erster Ordnung in V_k keine Beiträge auftreten, die die Anzahl der Elektronen auf der Störstelle ändern. Das bedeutet, daß

$$[S, H_S + H_B] = -H_{SB}$$

gelten muß und man

$$H_{eff} = H_S + H_B + \frac{1}{2}[S, H_{SB}] + \dots$$

erhält. Für S erhält man

$$S = \sum_{k,\sigma} V_k \left(\frac{U}{(\epsilon_d - \epsilon_k)(\epsilon_d - \epsilon_k + U)} d_{-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_d} c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) - \text{h.c.}$$

H_{eff} erhält dann folgende Beiträge:

1. eine etwas verschobene Energie ϵ_d und eine etwas verschobene Wechselwirkung U .
2. einen Streuterm vom Typ $\sum_{k,q,\sigma} v_{k,q} c_{k,\sigma}^{\dagger} c_{q,\sigma}$
3. eine Dichte-Dichte-Wechselwirkung $\sum_{k,q} V_{k,q}^{(2)} (\sum_{\sigma} c_{k,\sigma}^{\dagger} c_{q,\sigma}) (\sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma})$
4. eine Spin-Spin-Wechselwirkung

$$-2 \sum_{k,q} V_{k,q}^{(2)} \vec{S}_{k,q} \cdot \vec{S}_d$$

mit

$$\vec{S}_{k,q} = \sum_{\sigma,\tau} c_{k,\sigma}^{\dagger} (\vec{\sigma})_{\sigma,\tau} c_{q,\tau}$$

$$\vec{S}_d = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\tau} d_{\sigma}^{\dagger} (\vec{\sigma})_{\sigma,\tau} d_{\tau}$$

Dabei ist $\vec{\sigma}$ der Vektor der Paulimatrizen.

Die beiden Terme unter 1. können leicht brücksichtigt werden. Der Term unter 2. führt zu Verschiebung der Einteilchenenergien und zu einer Veränderung der Blochzustände im Band, die häufig vernachlässigt wird. Im Term unter 3. ist $\sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} = 1$ (ein Elektron auf der Störstelle), dieser Term spielt die gleiche Rolle wie 2. Physikalisch wichtig ist der Term unter 4. Er stellt eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen dem Elektronenspin auf der Störstelle und dem Spin der Bandelektronen dar. Für den Koeffizienten erhält man

$$V_{k,q}^{(2)} = \frac{1}{2} V_k V_q U \left(\frac{1}{(\epsilon_d - \epsilon_k)(\epsilon_d - \epsilon_k + U)} + \frac{1}{(\epsilon_d - \epsilon_q)(\epsilon_d - \epsilon_q + U)} \right)$$

Liegen beide Impulse direkt an der Fermikante, dann erhält man

$$V_{k_F, k_F}^{(2)} = \frac{V^2 U}{\epsilon_d (\epsilon_d + U)}$$

Entfernt man sich von der Fermikante, dann erhält man die für störungstheoretische Rechnungen charakteristischen Divergenzen. Sehr häufig nimmt man als Approximation eine Konstante Wechselwirkung $V_{k,q}^{(2)}$ an, der effektive Hamiltonoperator lautet dann bis auf eine Konstante

$$H_{eff} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - J \vec{s}(0) \vec{S}_d$$

wobei $\vec{s}(0)$ der Spin der Band-Elektronen am Ort der Störstelle ist.

4.2.2 Flußgleichungen

Der zweite Ansatz verwendet die Methode der Flußgleichungen, die wir oben schon kennengelernt haben. Anstelle einer Transformation $\exp(S)$, die störungstheoretisch ausgewertet wird, verwendet man eine kontinuierliche Transformation mit einer Erzeugenden η [9]. Die sich daraus ergebende Hamiltonoperator hat die gleiche Struktur wie der effektive Hamiltonoperator von oben, aber mit etwas anderen Koeffizienten $V_{k,q}^{(2)}$. Für den symmetrischen Fall $\epsilon_d = -U/2$ und für $k = k_F$ zeigt die Abbildung (Fig. 3 aus [9]) die wesentlichen Unterschiede:

1. Es tritt keine Divergenz auf.
2. An Stelle der ursprünglichen Wechselwirkung U tritt die renormierte Wechselwirkung U^R . In der Abbildung wurde in dem Schrieffer-Wolff-Resultat auch U^R eingesetzt.
3. Für große ϵ_q geht $V_{k_F,q}^{(2)}$ nicht gegen eine Konstante, sondern gegen 0. Es gibt eine effektive Bandkante von der Ordnung U^R .

4.3 Lösungsmethoden

Wir haben schon einen Variationsansatz kennengelernt, mit dem man unter bestimmten Bedingungen eine gute Approximation für den Grundzustand des Andersonmodells finden kann. Einen ähnlichen Ansatz kann man auch für das Kondomodell machen. Diese Variationsansätze liefern einen ersten Hinweis auf die Struktur der Lösung des Problems, sind aber für detaillierte Analysen nicht geeignet. Folgende Methoden können erfolgreich verwendet werden (das gilt für beide Modelle):

1. Die numerische Renormierung [10].
2. Bethe-Ansatz Lösung [11].

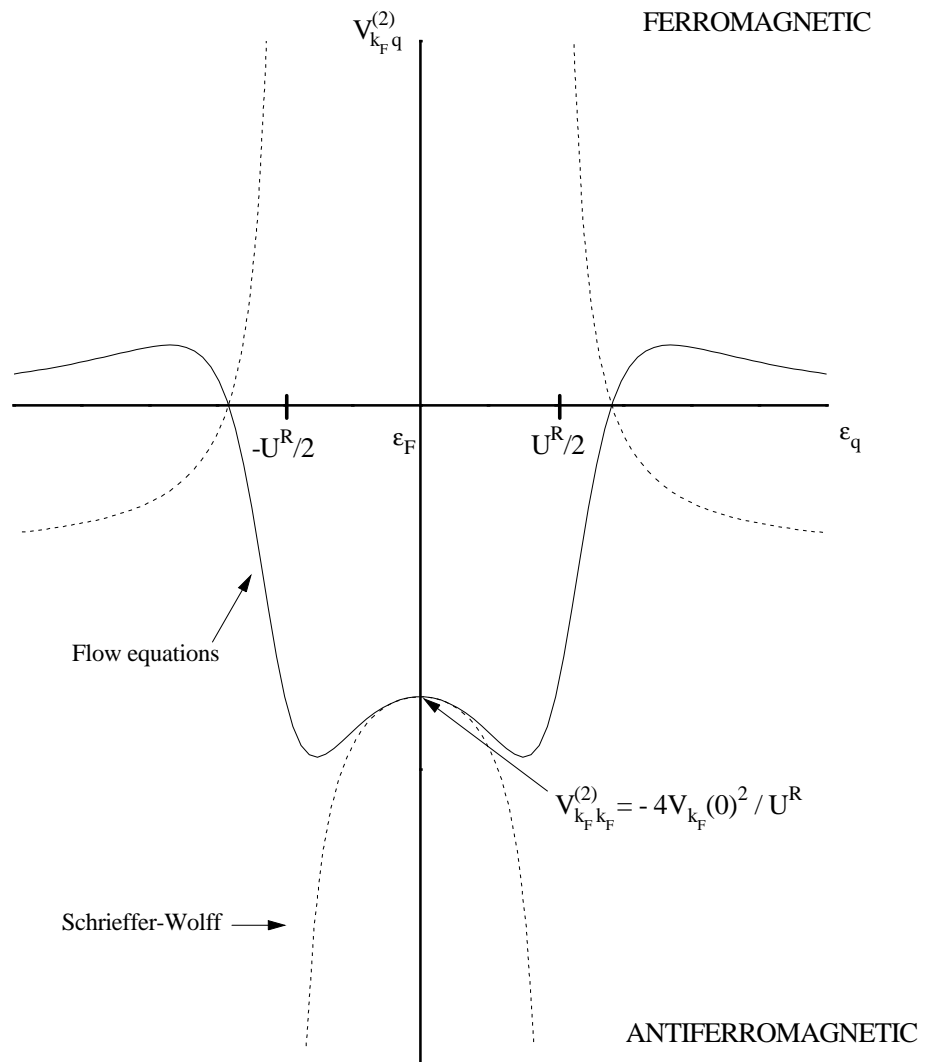
In beiden Fällen geht man in der Regel von einer konstanten Hybridisierung V_k und einer konstanten Zustandsdichte aus. Die Bethe-Ansatz Lösung läßt sich nur in diesem Fall verwenden, streng genommen sogar nur im Limes $D \rightarrow \infty$. Ein wesentliches Resultat beider Zugänge ist ein präziser Ausdruck für die Kondotemperatur

$$T_K = \frac{2}{\pi} D_{eff} \exp(-\Phi(2\rho(\epsilon_F) V_{k_F, k_F}^{(2)}))$$

mit

$$\Phi(x) = \frac{1}{|x|} - \frac{1}{2} \ln |x| + O(x)$$

Für die effektive Bandbreite D_{eff} erhält man einen Wert in der Größenordnung $U^R/2$, in Übereinstimmung mit den Flußgleichungen.



effektive Spin-Spin Wechselwirkung.

Die

5 Kompliziertere dissipative Quantensysteme

5.1 Gekoppelte Tunnelsysteme

In einem Festkörper mit einer endlichen Dichte von Störstellen kommt es im Vergleich zu einer Störstelle zu neuen Effekten. Zur Beschreibung dieser Effekte verwenden wir wie oben für eine Störstelle (Abschnitt 3) ein stark vereinfachtes Modell. Jede Störstelle wird als Tunnelsystem modelliert, wobei nur die beiden niedrigsten Zustände berücksichtigt werden. Damit erhält man den folgenden Hamiltonoperator

$$H = - \sum_i \frac{\Delta_i}{2} \sigma_{x,i} + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sum_{k,i} \sigma_{z,i} (\lambda_{k,i} b_k + \lambda_{k,i}^* b_k^\dagger) + E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{i,j} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} \quad (202)$$

Die Wechselwirkung $J_{i,j}$ verschwindet anfänglich und wird durch die Elimination der Kopplung an die Bosonen erzeugt. Der Index i nummeriert die Störstellen durch, jede Störstelle koppelt an die bosonischen Freiheitsgrade (e.g. Phononen). Im Unterschied zu dem einfachen Zwei-Niveau-System müssen wir jetzt komplexe $\lambda_{k,i}$ zulassen. Typischerweise wird die Phase vom Ort der Störstelle abhängen ($\propto \exp(\pm ikR_i)$). Diese Abhängigkeit kann auch nicht mehr durch eine Eichtransformation eliminiert werden. Nach den Erfahrungen für ein Zwei-Niveau-System behandeln wir diesen Hamiltonoperator mit Flußgleichungen. Die Erzeugende ist

$$\eta = \frac{1}{2} \sum_{k,i} \sigma_{z,i} (\eta_{k,i,z} b_k - \eta_{k,i,z}^* b_k^\dagger) + \frac{i}{2} \sum_k \sigma_{y,i} (\eta_{k,i,y} b_k + \eta_{k,i,y}^* b_k^\dagger) \quad (203)$$

mit komplexen Parametern $\eta_{k,i,x/y}$. Mit dieser Erzeugenden ergibt sich

$$[\eta, H] = \frac{1}{2} \sum_{k,i} \sigma_{z,i} ((\eta_{k,i,z} \omega_k - \eta_{k,i,y} \Delta_i) b_k + (\eta_{k,i,z}^* \omega_k - \eta_{k,i,y}^* \Delta_i) b_k^\dagger) \quad (204)$$

$$+ \frac{i}{2} \sum_{k,i} \sigma_{y,i} ((\eta_{k,i,y} \omega_k - \eta_{k,i,z} \Delta_i) b_k - (\eta_{k,i,y}^* \omega_k - \eta_{k,i,z}^* \Delta_i) b_k^\dagger) \quad (205)$$

$$+ \text{Terme} \propto \sigma_{x,i} b_k^{(\dagger)} b_{k'}^{(\dagger)} \quad (206)$$

$$+ \text{Terme} \propto \sigma_{x,i} \sigma_{z,j} b_k^{(\dagger)} \quad (207)$$

$$- \frac{1}{2} \sigma_x \sum_k \Re(\eta_{k,i,y}^* \lambda_{k,i}) (2n_k + 1) \quad (208)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_k \Re(\eta_{k,i,z} \lambda_{k,i}) \quad (209)$$

$$- \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} \Re(\eta_{k,i,y}^* \lambda_{k,j} + \eta_{k,j,y}^* \lambda_{k,i}) \quad (210)$$

Die Flußgleichungen, die sich damit ergeben, sind analog zu einem Zwei-Niveau-System

$$\frac{d\Delta_i}{d\ell} = \sum_k \Re(\lambda_{k,i}^* \eta_{k,i,y}) (2n_k + 1)$$

$$\frac{d\lambda_{k,i}}{d\ell} = \eta_{k,i,z} \omega_k - \eta_{k,i,y} \Delta_i$$

$$\frac{dJ_{i,j}}{d\ell} = \frac{1}{2} \sum_k \Re(\eta_{k,i,z} \lambda_{k,j}^* + \eta_{k,j,z} \lambda_{k,i}^*)$$

Analog zu früher wählen wir

$$\eta_{k,i,y} = -\Delta_i \frac{\omega_k - \Delta_i}{\omega_k + \Delta_i} \lambda_k$$

$$\eta_{k,i,z} = -\omega_k \frac{\omega_k - \Delta_i}{\omega_k + \Delta_i} \lambda_k$$

Ferner nehmen wir der Einfachheit halber an, daß

1. $\Delta_i(0) = \Delta_0$ unabhängig von i
2. $|\lambda_{k,i}(0)| = \lambda_k$ unabhängig von i .

Damit ist Δ_i von i unabhängig und man erhält für Δ_i und für $|\lambda_{k,i}|$ die selben Gleichungen wie vorher. Neu ist lediglich die Wechselwirkung $J_{i,j}$, in die auch die Phase der $\lambda_{k,i}$ eingeht. Diese Phase ist aber nicht ℓ -abhängig. Setzt man in der Gleichung für $J_{i,j}$ die Ausdrücke für η und λ ein und ersetzt man anschließend Δ durch Δ_∞ , dann lassen sich die Integrale berechnen und man erhält

$$J_{i,j,\infty} = \sum_k |\lambda_k|^2 \frac{\omega_k}{\omega_k^2 - \Delta_\infty^2} \cos(k(R_i - R_j))$$

Für Phononen ist $|\lambda_k|^2 \propto \omega_k \propto |k|$ und man erhält für große Distanzen $J_{i,j,\infty} \propto |R_i - R_j|^{-3}$.

Für $\ell \rightarrow \infty$ erhält man damit in erster Näherung den effektiven Hamiltonoperator von der Form

$$H_{eff} = -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_{\infty,i} \sigma_{x,i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{i,j,\infty} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} \quad (211)$$

Da die Störstellen zudem unregelmäßig im Kristall verteilt sind, erhält man Kopplungen $J_{i,j}$, die in bestimmten Grenzen statistisch verteilt sind.

Eine ausführliche Darstellung der Physik dieser Systeme (beschrieben durch (211)) finden Sie in [12]. Ich gehe im folgenden auf einige Aspekte etwas ein.

5.2 Geringe Störstellendichte

Zunächst betrachten wir den Grenzfall einer geringen Störstellendichte. In diesem Fall zerfällt H_{eff} in einen Teil nicht wechselwirkender Störstellen und einen Teil von Störstellen, die dichter beieinander liegen und für die die Wechselwirkung berücksichtigt werden kann. Bei hinreichend niedriger Dichte genügt es, Paare von wechselwirkenden Zweiniveausystemen zu betrachten. Man hat also

$$H_{eff} = -\frac{1}{2} \sum_{i \in E_1} \Delta_{\infty,i} \sigma_{x,i} - \frac{1}{2} \sum_{i \in E_2} \Delta_{\infty,i} \sigma_{x,i} + \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E_2} J_{i,j} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j}$$

Dabei ist E_1 die Menge der isolierten Zweiniveausysteme, E_2 die Menge der Paare von Zweiniveausystemen. Da man je zwei Vertices aus E_1 immer zu einem Paar zusammenfassen kann, für das die Wechselwirkung verschwindet, kann man den Hamiltonoperator in der Form

$$H_{eff} = \sum_{(i,j) \in E_2} H_{(i,j)}$$

$$H_{(i,j)} = -\frac{1}{2} \Delta_{\infty,i} \sigma_{x,i} - \frac{1}{2} \Delta_{\infty,j} \sigma_{x,j} + J_{i,j} \sigma_{z,i} \sigma_{z,j}$$

schreiben. Der Unterschied zu (211) besteht darin, daß der Hamiltonoperator nun in disjunkte Paare zerfällt und wir nur noch den Hamiltonoperator für ein Paar lösen müssen. Wir betrachten im folgenden den einfachen Fall, wo alle $\Delta_{\infty,i}$ gleich sind und bezeichnen diesen Parameter mit Δ . Für ein Paar ist H ein 4×4 -Matrix von der Form

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -J & 0 & -\Delta & -\Delta \\ 0 & -J & -\Delta & -\Delta \\ -\Delta & -\Delta & J & 0 \\ -\Delta & -\Delta & 0 & J \end{pmatrix}$$

Die orthogonale Transformation

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

führt auf

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & -2\Delta & 0 \\ 0 & -2\Delta & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J \end{pmatrix}$$

mit dem Spektrum

$$\left\{ \pm \frac{1}{2} \sqrt{J^2 + 4\Delta^2}, \pm \frac{1}{2} J \right\}$$

Aus der Darstellung \tilde{H} kann man $\exp(-\beta\tilde{H})$ berechnen und schließlich auf die ursprüngliche Basis zurücktransformieren. Als Ergebnis erhält man

$$\rho_{(i,j)} = 1 + w_x(\sigma_{x,i} + \sigma_{x,j}) + \sum_{\alpha=x,y,z} w_{\alpha}^{(2)} \sigma_{\alpha,i} \sigma_{\alpha,j}$$

mit

$$\begin{aligned} w_x &= -\frac{\Delta}{\eta_+ + \eta_-} (\tanh(\beta\eta_-/2) + \tanh(\beta\eta_+/2)) \\ w_x^{(2)} &= \tanh(\beta\eta_-/2) \tanh(\beta\eta_+/2) \\ w_y^{(2)} &= \frac{\eta_-}{\eta_+ + \eta_-} \tanh(\beta\eta_+/2) - \frac{\eta_+}{\eta_+ + \eta_-} \tanh(\beta\eta_-/2) \\ w_z^{(2)} &= \frac{\eta_+}{\eta_+ + \eta_-} \tanh(\beta\eta_+/2) - \frac{\eta_-}{\eta_+ + \eta_-} \tanh(\beta\eta_-/2) \end{aligned}$$

wobei

$$\eta_{\pm} = \frac{1}{2} (\sqrt{J^2 + 4\Delta^2} \pm J)$$

Mit dieser Darstellung von ρ lassen sich thermodynamische Erwartungswerte berechnen. Für die Energie erhält man

$$E = -\frac{1}{2} \eta_+ \tanh(\beta\eta_+/2) - \frac{1}{2} \eta_- \tanh(\beta\eta_-/2) \quad (212)$$

Das ist die Energie für ein Paar. Betrachtet man alle Paare, dann müssen wir über alle Paare summieren. Dazu müssen wir die Verteilung der Kopplungen J kennen. Nimmt man an, daß die Störstellen homogen verteilt sind, daß es aber einen maximalen Abstand für zwei Störstellen gibt, die zu einem Paar gehören, dann erhält man als Verteilungsfunktion für J

$$P(J) = \frac{I_c}{J^2} \text{ für } I_c \leq J$$

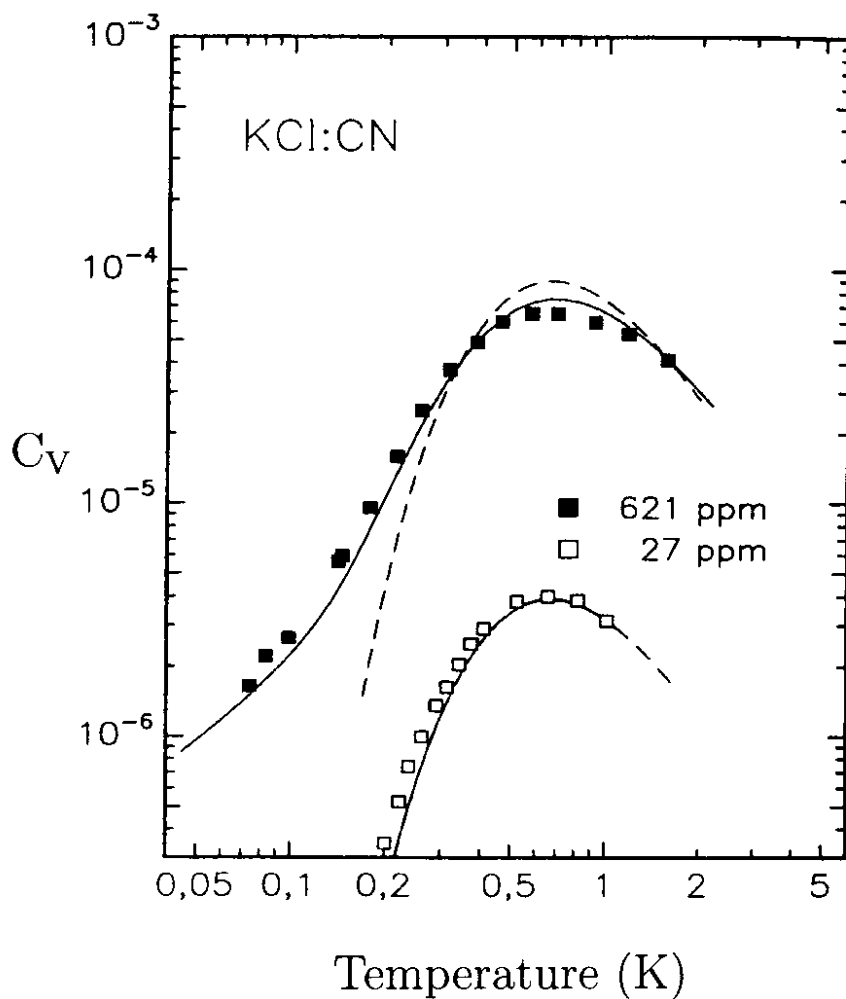


Abbildung 4.3 aus [12]. Gezeigt sind experimentelle Ergebnisse für die spezifische Wärme und die zugehörigen Theoriekurven.

Aus dieser Verteilung für J erhält man eine Verteilung der Eigenenergien und mit (212) einen Ausdruck für die Energiedichte. Leitet man nach der Temperatur ab, so erhält man den Beitrag der Störstellen zur spezifischen Wärme. Diese kann mit Experimenten verglichen werden, wenn man von den experimentellen Daten die spezifische Wärme des Wirtskristalls subtrahiert. Die Übereinstimmung ist für niedrige Konzentrationen in der Tat recht gut, für höhere Konzentrationen ergeben sich Abweichungen (Figs. 4.3 und 4.4 in [12]).

5.3 Höhere Störstellendichte

Für höhere Störstellendichte ist das obige Paarmodell unzureichend und man muß direkt mit dem Hamiltonoperator (211) rechnen. Ich verweise hier auf [12] für Näherungsverfahren, die in diesem Fall Anwendung finden, und Resultate.

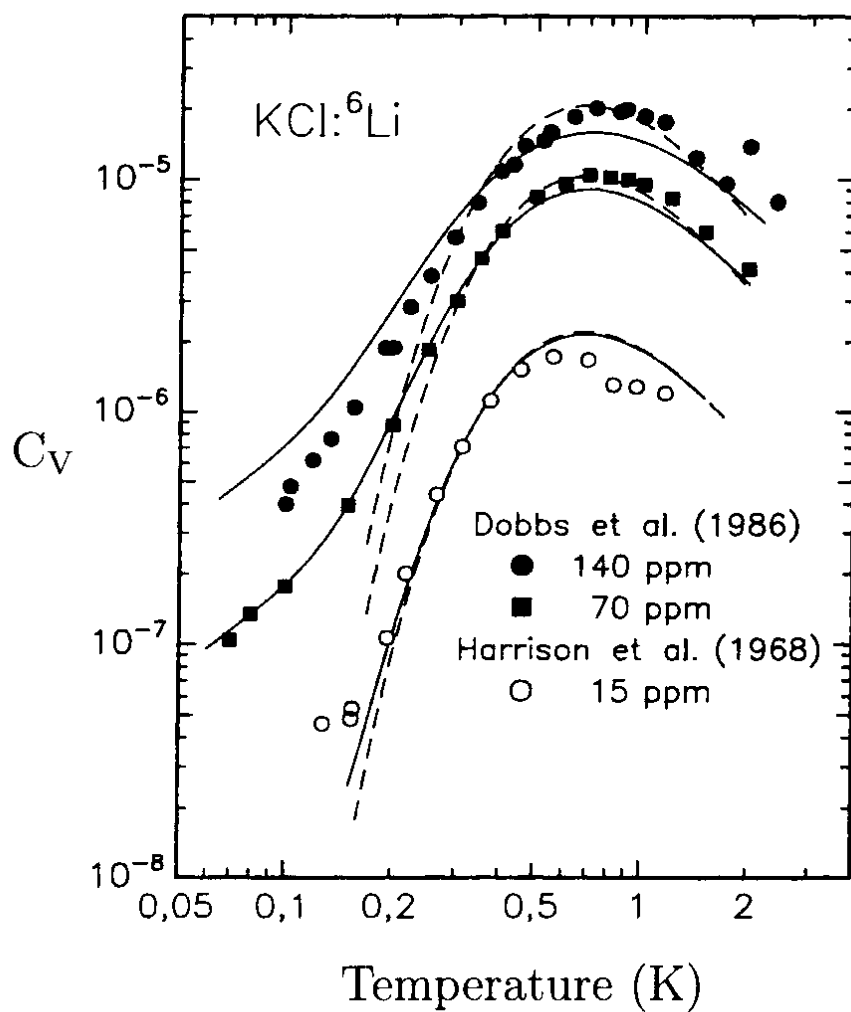


Abbildung 4.4 aus [12].

6 Das Polaron

6.1 Einführung

Das Polaronproblem ist eines der klassischen Probleme der Festkörperphysik. Die physikalische Fragestellung betrifft die Bewegung von Elektronen in polaren Gittern, z.B. in Ionenkristallen. Durch die Anwesenheit des Elektrons wird der Kristall polarisiert. Bewegt sich das Elektron durch den Kristall, dann schleppt es die Polarisationswolke mit sich. Das Elektron kann zusammen mit seiner Polarisationswolke als Quasiteilchen beschrieben werden, das man Polaron nennt. Zuerst wurde dieses Problem von Fröhlich untersucht [13], für eine Einführung verweise ich auf [14].

Der Hamiltonoperator für dieses Problem hat die Form

$$H = \frac{p^2}{2m} + \omega \sum_k b_k^\dagger b_k + \sum_k (\lambda_k b_k \exp(ikr) + \lambda_k^* b_k^\dagger \exp(-ikr))$$

Dabei ist p der Impuls des Elektron, r sein Ortsoperator. Die Phononen sind in diesem Modell optische Phononen, wir verwenden der Einfachheit halber ein Einsteinmodell, bei dem alle Phononenenergien ω gleich sind. Im übrigen hat der Hamiltonoperator die typische Struktur eines dissipativen Quantensystems. Das System ist dreidimensional, p , r , und k sind also dreidimensionale Größen. Im Vergleich zu den bisherigen Rechnungen sind aber zwei Aspekte unterschiedlich:

1. Das Quantensystem hat ein kontinuierliches Spektrum.
2. Das Bad ist entartet.

Das Modell läßt sich für schwache Kopplung störungstheoretisch behandeln. Störungstheorie versagt aber relativ schnell und man benötigt andere Zugänge. Speziell für starke Kopplung ergeben sich interessante Resultate, die Gegenstand aktueller Forschung sind.

6.2 Störungstheorie

Wir gehen auf die Störungstheorie nur ein, um einige grundlegende Definitionen einzuführen. Ohne Elektron-Phonon-Kopplung sind die Energien des Hamiltonoperator durch

$$\epsilon_k + \omega N_{\text{ph}}$$

gegeben, wobei $\epsilon_k = k^2/(2m)$. Der Beitrag erster Ordnung Störungstheorie zu den Eigenenergien verschwindet, in zweiter Ordnung erhält man

$$\delta\epsilon_k = \sum_q \frac{|\lambda_q|^2}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \omega}$$

Um diesen Ausdruck auswerten zu können, müssen wir die Kopplungen λ_q kennen. Es gilt [14]

$$\lambda_q = \frac{i\omega}{|q|} \left(\frac{4\pi\alpha}{V\gamma} \right)^{1/2}$$

Dabei ist $\gamma = (2m\omega)^{1/2}$, das entspricht der Wellenzahl des Elektrons bei einer Energie ω . α ist eine dimensionslose Kopplungskonstante, die die Stärke der Elektron-Phonon Kopplung beschreibt. V ist das Volumen. Bildet man den thermodynamischen Limes, dann gilt

$$\delta\epsilon_k = \frac{\alpha\omega\gamma}{2\pi^2} \int d^3q \frac{1}{q^2} \frac{1}{k^2 - (k-q)^2 - \gamma^2}$$

Dieses Integral kann analytisch berechnet werden, man findet

$$\delta\epsilon_k = -\alpha\omega \frac{\sin^{-1}(k/\gamma)}{k/\gamma}$$

Verwendet man $\sin^{-1} x = x + x^3/6 + \dots$, dann findet man

$$\epsilon_k + \delta\epsilon_k = -\alpha\omega + \frac{k^2}{2m} \left(1 - \frac{\alpha}{6}\right) + O(k^4)$$

Physikalisch erhält man also eine effektive Masse

$$m^* = \frac{m}{1 - \alpha/6}$$

und eine Besetzungszahl α für die Phononen. Diese Rechnung ist nur für $\alpha \ll 1$ sinnvoll.

Numerische Werte von α sind für einige Substanzen in der folgenden Tabelle zusammengestellt:¹

Substanz	α
InSb	0,015
CdS	0,65
AgCl	1,90
KBr	3,07
KCl	3,46

Es gibt also große Variationen für die Stärke der Kopplung und die Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Störungsrechnung ist für viele Materialien nicht gegeben.

6.3 Variationsansatz

In diesem Abschnitt führen wir eine Variationsrechnung durch, die zumindest für mittlere Kopplungen gerechtfertigt ist. Zunächst stellen wir fest, daß der Gesamtimpuls

$$P = p + \sum_k k b_k^\dagger b_k$$

eine Erhaltungsgröße ist. Wir führen zunächst die unitäre Transformation

$$S = \exp(i(Q - \sum_k k b_k^\dagger b_k)r)$$

durch. Es gilt

$$S^{-1}PS = Q + p$$

$$S^{-1}pS = Q - \sum_k k b_k^\dagger b_k + p$$

$$S^{-1}b_k S = b_k \exp(-ikr)$$

Der Hamiltonoperator lautet damit

$$S^{-1}HS = \frac{1}{2m} \left(Q - \sum_k k b_k^\dagger b_k + p\right)^2 + \omega \sum_k b_k^\dagger b_k + \sum_k (\lambda_k b_k + \lambda_k^* b_k^\dagger)$$

¹nach [14] und J.W. Hodby, J. Phys. C4, **L8** (1971).

In dieser Form ist der Gesamtimpuls $Q + p$ und der Elektronenimpuls p eine Erhaltungsgröße, da der Hamiltonoperator nicht von dem Ort r abhängt. Wir können damit p wie eine Zahl behandeln und setzen (o.B.d.A) $p = 0$.

Der Variationsansatz, den wir verwenden wollen, lautet

$$\Psi = U|0\rangle, \quad U = \exp\left(\sum_k (f_k b_k^\dagger - f_k^* b_k)\right)$$

Es gilt

$$U^{-1} b_k U = b_k + f_k, \quad U^{-1} b_k^\dagger U = b_k^\dagger + f_k^*$$

Damit erhält man für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2m} \left(Q - \sum_k k f_k^* f_k + p \right)^2 + \omega \sum_k f_k^* f_k + \sum_k (\lambda_k f_k + \lambda_k^* f_k^*) \\ &= \frac{1}{2m} Q^2 + \sum_k (\lambda_k f_k + \lambda_k^* f_k^*) + \frac{1}{2m} \left(\sum_k k f_k^* f_k \right)^2 \\ &\quad + \sum_k \left(\omega - \frac{1}{m} k Q + \frac{1}{2m} k^2 \right) f_k^* f_k \end{aligned}$$

Aus den Bedingungen $\partial E / \partial f_k$ und $\partial E / \partial f_k^*$ für das Minimum erhält man

$$\lambda_k + f_k^* \left(\omega - \frac{1}{m} k Q + \frac{1}{2m} k^2 \right) + \frac{1}{m} \left(\sum_{k'} k' f_{k'}^* f_{k'} \right) k f_k^* = 0$$

Nur im letzten Term tritt die Richtungsabhängigkeit der f_k auf. Da nur Q eine Richtung vorgibt, setzen wir

$$\sum_{k'} k' f_{k'}^* f_{k'} = \eta Q$$

Damit erhält man

$$f_k^* = \frac{-\lambda_k}{\omega - \frac{kQ}{m}(1 - \eta) + \frac{k^2}{2m}}$$

Eingesetzt in die Definition von η ergibt sich

$$\eta Q = \sum_k \frac{k |\lambda_k|^2}{\left(\omega - \frac{kQ}{m}(1 - \eta) + \frac{k^2}{2m} \right)^2}$$

Für die Energie erhält man

$$E = \frac{Q^2}{2m} (1 - \eta^2) - \sum_k \frac{|\lambda_k|^2}{\omega - \frac{kQ}{m}(1 - \eta) + \frac{k^2}{2m}}$$

Die Summe hat die gleiche Form wie die entsprechende Summe in der Störungsrechnung. Im thermodynamischen Limes kann man zum Integral übergehen und erhält

$$E = \frac{Q^2}{2m} (1 - \eta^2) - \alpha \omega \frac{\sin^{-1} \tilde{Q}}{\tilde{Q}}$$

mit $Q = Q(\tilde{1} - \eta)/\gamma$. Um dies Auszuwerten, beschränken wir uns auf kleine Q und entwickeln nach Q . Aus der Bedingung für η erhält man

$$\frac{\eta}{1 - \eta} = \frac{\alpha}{6} \implies \eta = \frac{\alpha/6}{1 + \alpha/6}$$

und für E ergibt sich

$$\begin{aligned} E &= -\alpha\omega + \frac{Q^2}{2m}(1 - \eta^2 - \frac{\alpha}{6}(1 - \eta)^2) + O(Q^4) \\ &= -\alpha\omega + \frac{Q^2}{2m(1 + \frac{\alpha}{6})} \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck stimmt in führender Ordnung in α mit der Störungsrechnung überein. Für die effektive Masse erhält man jetzt

$$m^* = m(1 + \frac{\alpha}{6})$$

Der Zustand Ψ kann in der Form

$$\Psi = \prod_k \exp(-\frac{1}{2}|f_k|^2 + f_k b_k^\dagger) |0\rangle$$

geschrieben werden. Dieser Zustand enthält keine Korrelationen zwischen den Phononen. Er kann deshalb für schwache und mittlere Kopplungen verwendet werden, nicht aber für starke Kopplungen, da dann durch die Bewegung des Elektrons Korrelationen zwischen den Phononen induziert werden.

6.4 Starke Kopplung

Möchte man genauere Ergebnisse zum Polaron bekommen, oder Ergebnisse bei starker Kopplung, dann ist man auf andere Verfahren angewiesen. Mögliche Zugänge sind

1. Verbesserte oder andere Variationsansätze
2. Pfadintegralmethoden
3. Renormierungsverfahren

Variationsansätze für starke Kopplungen finden sich u.a bei Pekar [15]. Für sehr starke Kopplung erhält man danach aus einem Variationsansatz als obere Schranke für die Energie $E = -0.109\alpha^2$. Mit anderen Methoden kann man zeigen, daß dies auch eine untere Schranke ist (mit Korrekturen $O(\alpha^{9/5})$) und damit das korrekte Verhalten für die Energie bei starker Kopplung darstellt.

Man kann das Problem mit Pfadintegralen formulieren. In dieser Formulierung können die Phononen ausintegriert werden, übrig bleibt eine Beschreibung für das Elektron, daß eine durch die Phononen induzierte retardierte Selbstwechselwirkung enthält. Dieses Problem kann dann durch geeignete Näherungen gelöst werden, die über weite Bereiche, also auch für stärkere Kopplungen zufriedenstellende Resultate liefern.

Literatur

- [1] A.O. Caldeira und A.J. Leggett: Ann. Phys. (N.Y.) **149**, 374 (1983); **153**, 445(E) (1984).
- [2] A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg und W. Zwerger: Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987); erratum Rev. Mod. Phys. **67**, 725 (1995).
- [3] U. Weiss: Quantum Dissipative Dynamics, Series in modern condensed matter physics, vol.2. World Scientific, Singapore (1993).

-
- [4] S. Kehrein, A. Mielke und P. Neu: Z.Phys. B **99**, 269 (1996).
- [5] S. Kehrein und A. Mielke: Ann. Phys. (Leipzig) **6**, 90-135 (1997).
- [6] S. Kehrein und A. Mielke: J. Stat. Phys. **90**, 889-898 (1998).
- [7] A.C. Hewson, "The Kondo Problem to Heavy Fermions." Cambridge Studies in Magnetism, Vol. 2, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1993.
- [8] J.R. Schrieffer und P.A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [9] S. Kehrein und A. Mielke: Ann. Phys. (NY) **252**, 1-32 (1996).
- [10] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [11] A.M. Tsvelick und P.B. Wiegmann, Adv. Phys. **32**, 453 (1983).
- [12] A. Würger, "From Coherent Tunneling to Relaxation." Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1997.
- [13] H. Fröhlich, Proc. Phys. Soc. **A160**, 230 (1937).
- [14] O. Madelung, "Festkörpertheorie II." Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1972 (Heidelberger Taschenbücher, Band 109).
- [15] S.I. Pekar, "Untersuchung über die Elektronentheorie der Kristalle." Akademieverlag Berlin 1954.