Flußgleichungen für Hamiltonoperatoren

Andreas Mielke[1]

Institut für Theoretische Physik,
Ruprecht–Karls–Universität,
Philosophenweg 19,
D-69120 Heidelberg, F.R. Germany

Vorlesung, Sommersemester 1996

Dienstag, 9-11,
Philosophenweg 19, Seminarraum.

[1] E–mail: mielke@hybrid.tphys.uni-heidelberg.de

Kapitel 1

Einführung

Inhalt und Ziele der Vorlesung:

- Renormierungsverfahren für Hamiltonoperatoren (hauptsächlich analytisch).

  darin: Arbeiten von Wilson 1965, 1970 [1, 2], störungstheoetische Renormierung, (numerische Renormierung).

- kontinuierliche unitäre Transformationen.

  darin: Flußgleichungen, wie sie in unserer Arbeitsgruppe benutzt werden [3], kontinuierliche unitäre Transformationen zur Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren. Unitäre Renormierung (similarity renormalization) nach Glazek und Wilson [4, 5].

Wesentliches Ziel: Verstehen der Methoden. Wie hängen die Methoden zusammen? Was ist jeweils anders? Wo liegen Vor- und Nachteile.

Daneben: Behandlung unterschiedlicher Modelle, die meist recht einfach sind und beispielhaften Charakter haben. Da die Modelle unterschiedlichen Gebieten der Physik entnommen sind und die Resultate zum Teil neu oder noch nicht publiziert sind, kann man hoffentlich auch etwas über die Physik lernen.

Motivation

Warum Hamiltonoperatoren?

Renormierung wird oft in einer Lagrangeformulierung durchgeführt. Wirkung, ausintegrieren von Freiheitgraden, ...

Gründe für die Verwendung von Hamiltonoperatoren:

- Hamiltonoperatoren werden in etlichen Gebieten der Physik viel oder nahezu ausschließlich verwendet, in manchen Bereichen erscheint ihre Verwendung natürlich (Atom- und Molekülphysik, Quantenchromodynamik auf dem Lichtkegel).

- Es gibt mathematisch wohlverstandene Methoden zur Behandlung von Hamiltonoperatoren (e.g. Störungsrechnung, WKB-Approximation).

- Für die Beschreibung gebundener Zustände oder die Beschreibung elementarer Anregungen durch Quasiteilchen bietet sich die Hamiltonsche Formulierung an.

- Ein Hamiltonoperator kann in einer geeigneten, physikalisch motivierten Basis als Matrix dargestellt und diagonalisiert werden.

- Interessiert man sich für das Langzeitverhalten in Systemen, so ist bei der Verwendung von Hamiltonoperatoren automatisch die Unitarität der Zeitentwicklung gesichert. Das ist wichtig, wenn Näherungen durchgeführt werden.

Gliederung (vorläufig)

- Renormierung von Hamiltonoperatoren, insbesondere störungstheoretische Renormierung.
- kontinuierliche unitäre Transformationen zur Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren.
- kontinuierliche Transformationen zur Renormierung von Hamiltonoperatoren.
- evt. Deformation von Spektren und Renormierung (mathematisch exakte Renormierung).

Kapitel 2

Renormierung von Hamiltonoperatoren

2.1 Einführung

Renormierung: erste Arbeiten von Dyson [6], Ward [7, 8] und anderen. Allgemein anwendbares Verfahren zur Renormierung von Hamiltonoperatoren von Wilson [1]. Darin wird als Beispiel ein Modell untersucht, das die Wechselwirkung einer festen Quelle (Nukleon) mit skalaren Mesonen ($\pi^{\pm}$) beschreibt.

$$H = \int_k \omega_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + g_0 \int_k (2\omega_k)^{-1/2}((a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \tag{2.1}$$

wobei

$\int_k$ für $(2\pi)^{-3} \int d^3k$ steht,

$\omega_k = (k^2 + \mu^2)^{1/2}, \mu = 1,$

$a_k^\dagger$ erzeugt π^+,

$b_k^\dagger$ erzeugt π^-,

σ_+ transformiert den Neutron Zustand in einen Proton Zustand,

σ_- transformiert den Proton Zustand in einen Neutron Zustand.

Bosonische Vertauschungsrelationen

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = [b_k, b_{k'}^\dagger]. = (2\pi)^3 \delta^3(k - k') \tag{2.2}$$

Vergleichbare Modelle, Bosonen in Wechselwirkung mit einem Zwei-Niveau-System, gibt es in der Festkörperphysik (Tunnelsysteme u.a.), in der Atomphysik (Atom in Wechselwirkung mit einem Strahlungsfeld), und in vielen anderen Gebieten. Das einfachste Modell in dieser Klasse ist das Spin–Boson Modell

$$H = \int_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \int_k g_k (b_k + b_k^\dagger)\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta\sigma_x \tag{2.3}$$

Renormierungsproblem: Grundzustandsenergie divergiert, Wechselwirkungsenergie divergiert, etc. In Störungsrechnung treten diese Divergenzen in Form von Integralen auf: $\int_k k^{-2}$ divergiert linear, $\int_k k^{-3}$ divergiert logaritmisch, etc. Einführung eines Abschneideparameters k_c: H_{k_c} hat die gleiche Form wie H mit der Einschränkung, daß Integrale auf $k < k_c$ beschränkt sind. Renormierung: Bestimme die Kopplungen als Funktionen von k_c so, daß physikalische Erwartungswerte von k_c unabhängig sind.

2.2 Renormierung des Spin–Boson Modells

2.2.1 Renormierung nach Wilson

$$H_{k_c} = H_0 + H_{k_0} \tag{2.4}$$

mit

$$H_0 = \int_{k_0<k<k_c} \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}\int_{k_0<k<k_c} g_k(b_k + b_k^\dagger)\sigma_z \tag{2.5}$$

und $k_0 > \Delta$. Betrachte H_{k_0} als Störung zu H_0.

$$\begin{aligned} H_0 &= \begin{pmatrix} \int_{k_0<k<k_c} \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}\int_{k_0<k<k_c} g_k(b_k+b_k^\dagger) & 0 \\ 0 & \int_{k_0<k<k_c} \omega_k b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2}\int_{k_0<k<k_c} g_k(b_k+b_k^\dagger) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \int_{k_0<k<k_c} [\omega_k(b_k^\dagger + \frac{g_k}{2\omega_k})(b_k + \frac{g_k}{2\omega_k}) - \frac{g_k^2}{4\omega_k}] & 0 \\ 0 & \int_{k_0<k<k_c} [\omega_k(b_k^\dagger - \frac{g_k}{2\omega_k})(b_k - \frac{g_k}{2\omega_k}) - \frac{g_k^2}{4\omega_k}] \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.6}$$

Grundzustandsenergie ist $-\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k^2}{4\omega_k}$. Grundzustände: $(b_k \pm \frac{g_k}{2\omega_k})|\pm>= 0$

$$|+>= N_0^{-\frac{1}{2}} \exp(-\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k}{2\omega_k} b_k^\dagger)|0> \times |\uparrow> \tag{2.7}$$

$$|->= N_0^{-\frac{1}{2}} \exp(\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k}{2\omega_k} b_k^\dagger)|0> \times |\downarrow> \tag{2.8}$$

mit

$$N_0 = \exp(\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k^2}{4\omega_k^2}). \tag{2.9}$$

In erster Ordnung der Störungsrechnung findet man

$$H_{\mathrm{ren}} = P_0 H_{k_c} P_0 \tag{2.10}$$

Wegen

$$\begin{aligned} <+|\sigma_x|-> &= N_0^{-1} <0|\exp(-\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k}{2\omega_k} b_k^\dagger)\exp(\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k}{2\omega_k} b_k^\dagger)|0> \\ &= \exp(-\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k^2}{2\omega_k^2}) \\ &= <-|\sigma_x|+> \end{aligned} \tag{2.11}$$

gilt

$$H_{\mathrm{ren}} = E_0 + \int_{k<k_0} \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}\int_{k<k_0} g_k(b_k+b_k^\dagger)\sigma_z + \frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{ren}}\sigma_x \tag{2.12}$$

mit

$$\Delta_{\text{ren}} = \Delta \exp(-\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k^2}{2\omega_k^2}). \tag{2.13}$$

Dieser Prozeß kann iterativ durchgeführt werden. Schließlich kann k_0 so gewählt werden, daß $\omega_{k_0} \gtrapprox \Delta_{\text{ren}}$. Im Limes $k_c \to \infty$ muß auch $\Delta \to \infty$ damit Δ_{ren} nicht verschwindet. In dieser ersten Ordnung werden also Δ und E_0 renormiert. Beispiel: $\omega_k \propto k$, $g_k \propto k^{-\frac{1}{2}}$, $d = 3$ liefert

$$\int_{k<k_c} \frac{g_k^2}{\omega_k^2} \propto \ln k_c \tag{2.14}$$

Das entspricht dem Modell eines Atoms (Zwei–Niveau–System) im Strahlungsfeld.

2.2.2 Störungstheoretische Renormierung

Wählt man in der obigen Behandlung $k_0 = k_c - \Delta k_c$, dann findet man

$$\Delta(k_c) - \Delta(k_c - \Delta k_c) = \Delta(k_c) \frac{g_{k_c}^2 k_c^2}{4\pi^2 \omega_{k_c}^2} \Delta k_c \tag{2.15}$$

oder in differentieller Form die Flußgleichung

$$\frac{d\Delta(k_c)}{dk_c} = \Delta(k_c) \frac{g_{k_c}^2 k_c^2}{4\pi^2 \omega_{k_c}^2}. \tag{2.16}$$

Die Lösung ist wie vorher

$$\Delta(k_c) = \Delta(k_0) \exp(\int_{k_0<k<k_c} \frac{g_k^2}{2\omega_k^2}). \tag{2.17}$$

Diese Übereinstimmung ist nicht generisch.

2.3 Renormierung des Modells von Wilson

$$H = \int_k \omega_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \int_k g_k ((a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \tag{2.18}$$

Symmetrien des Modells:

$$Q = \int_k (a_k^\dagger a_k - b_k^\dagger b_k) + \sigma_z \tag{2.19}$$

ist eine Erhaltungsgröße. H ist invariant unter Ladungskonjugation, $H = U^{c\dagger} H U^c$, mit

$$U^c = U^{c\dagger} = (U^c)^{-1} \tag{2.20}$$

$$U^{c\dagger} a_k U^c = b_k, \quad U^{c\dagger} b_k U^c = a_k \tag{2.21}$$

$$U^{c\dagger} \sigma_+ U^c = \sigma_-, \quad U^{c\dagger} \sigma_- U^c = \sigma_+ \tag{2.22}$$

2.3.1 Reduktion von k_c

$$H_{k_c} = \int_{k<k_c} \omega_k(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \int_{k<k_c} g_k((a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \tag{2.23}$$

Aufteilung:

$$H_{k_c} = H_0 + H_{k_c-\Delta k_c} \tag{2.24}$$

$$H_0 = \int_{k_c-\Delta k_c<k<k_c} \omega_k(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \int_{k_c-\Delta k_c<k<k_c} g_k((a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \tag{2.25}$$

Finde unitäre Transformation U_0, die H_0 diagonalisiert.

$$U_0^\dagger H_{k_c} U_0 = U_0^\dagger H_0 U_0 + U_0^\dagger H_{k_c-\Delta k_c} U_0 \tag{2.26}$$

Konstruiere effektiven Hamiltonoperator mit dem neuen Abschneideparameter $k_0 = k_c - \Delta k_c$, indem $U_0^\dagger H_{k_c-\Delta k_c} U_0$ als Störung zu $U_0^\dagger H_0 U_0$ behandelt wird. Da U_0 nur auf die Spinoperatoren wirkt, kann man in führender Ordnung in den Termen

$$g_k((a_k + b_k^\dagger)U_0^\dagger \sigma_+ U_0 + (a_k^\dagger + b_k)U_0^\dagger \sigma_- U_0) \tag{2.27}$$

die Ausdrücke $U_0^\dagger \sigma_+ U_0$, $U_0^\dagger \sigma_- U_0$ durch Grundzustandserwartungswerte bezüglich der Grundzustände von $U_0^\dagger H_0 U_0$ ausdrücken.

$$U_0^\dagger \sigma_+ U_0 \to \langle U_0^\dagger \sigma_+ U_0 U^c \rangle \sigma_+ = F_0 \sigma_+ \tag{2.28}$$

Das entspricht der Behandlung von $H_{k_c-\Delta k_c}$ als Störung zu H_0 in führender Ordnung. Der neue Hamiltonoperator lautet

$$H_{k_0} = \int_{k<k_0} \omega_k(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \int_{k<k_0} g_k^{(1)}((a_k + b_k^\dagger)\sigma_+ + (a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \tag{2.29}$$

mit $g_k^{(1)} = F_0 g_k$. Das ist die Renormierungsgleichung für g_k. Die Renormierung des Modells wird durchgeführt, indem man mehrere Renormierungsschritte nacheinander durchführt, solange bis der Abschneideparameter klein ist.

Das Ergebnis hängt möglicherweise davon ab, wie groß die einzellnen Intervalle gewählt werden. Wie müssen die Intervalle gewählt werden? Da U_0 nicht bekannt ist, stellt sich die Frage, wie die Erwartungswerte berechnet werden.

2.3.2 Störungstheoretische Renormierung

$$U_0 = \exp(\eta), \quad \eta^\dagger = -\eta \tag{2.30}$$

$$U_0^\dagger H_0 U_0 = H_0 - [\eta, H_0] + \frac{1}{2}[\eta,[\eta,H_0]] - +... \tag{2.31}$$

Wähle

$$\begin{aligned} \eta \;=\; & \int_{k_0<k<k_c} \eta_k((a_k - b_k^\dagger)\sigma_+ + (-a_k^\dagger + b_k)\sigma_-) \\ & -\sigma_z \int_{k_0<k,k'<k_c} \eta_{kk'}(a_k^\dagger a_{k'} - a_{k'}^\dagger a_k - b_k^\dagger b_{k'} + b_{k'}^\dagger b_k) \\ & -\sigma_z \int_{k_0<k,k'<k_c} \tilde\eta_{kk'}(a_k b_{k'} - a_{k'} b_k - a_k^\dagger b_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger b_k^\dagger). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Hierbei ist $\eta_k = O(g)$, $\eta_{kk'}$, $\tilde{\eta}_{kk'} = O(g^2)$. Mit $\eta_k = g_k/\omega_k$ und geeigneten $\eta_{kk'}$, $\tilde{\eta}_{kk'}$ gilt

$$U_0^\dagger H_0 U_0 = \int_{k_0<k<k_c} \omega_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) - 2 \int_{k_0<k<k_c} \eta_k g_k + O(g^3). \tag{2.33}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} F_0 &= \langle U_0^\dagger \sigma_+ U_0 U^c \rangle \\ &= \langle (\sigma_+ - [\eta, \sigma_+] + \frac{1}{2}[\eta, [\eta, \sigma_+]] + O(g^3)) U^c \rangle \\ &= \langle (\sigma_+ + \frac{1}{2} \int_{k_0<k<k_c} \eta_k^2 [(a_k - b_k^\dagger)\sigma_+, (a_k^\dagger - b_k)\sigma_z] + O(g^3)) U^c \rangle \\ &= 1 - \int_{k_0<k<k_c} \eta_k^2 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Im Limes $\Delta k_c \to 0$ erhält man

$$g_k(k_c - \Delta k_c) = g_k(k_c) - g_k(k_c) \frac{1}{2\pi^2} \frac{g_{k_c}^2 k_c^2}{\omega_{k_c}^2} \Delta k_c \tag{2.35}$$

und damit die Flußgleichung

$$\frac{dg_k(k_c)}{dk_c} = g_k(k_c) \frac{g_{k_c}^2 k_c^2}{2\pi^2 \omega_{k_c}^2} \tag{2.36}$$

Aus Dimensionsgründen: $g_k = g_0/\omega_k^{1/2}$. Ist k groß verglichen mit μ, so findet man die folgende Flußgleichung für die Kopplungskonstante g_0:

$$\frac{dg_0(k_c)}{dk_c} = \frac{g_0(k_c)^3}{2\pi^2 k_c} \tag{2.37}$$

$$g_0(k_c)^2 = (g_0(k_0)^{-2} + \pi^2 \ln \frac{k_0}{k_c})^{-1} \tag{2.38}$$

Für vorgegebenes k_0 divergiert $g_0(k_c)$ für ein endliches k_c. Störungstheoretische Renormierung funktioniert nicht, da g_0 groß wird und damit die störungstheoretische Behandlung nicht mehr gerechtfertigt ist!

Ein ähnliches Problem tritt aber auch für ein anderes Modell auf, das Lee-Modell [9]. Im Lee-Modell läßt sich das Problem nicht beheben! Es ist dem Spin-Boson Modell sehr ähnlich (nur eine Sorte Bosonen, lineare Kopplung, ...).

Für endliches Δk_c muß $0 \leq F_0 \leq 1$ gelten. Das ist aber nicht erfüllt, wenn g_0 zu groß wird.

Wilson führt für sein Modell die Renormierung nur qualitativ durch. Eine quantitative Analyse ist nicht möglich.

2.4 Das allgemeine Verfahren

Renormierung von Hamiltonoperatoren:

- Zerlege H_{k_c} in der Form $H_{k_c} = H_0 + H_{k_0}$.

- Konstruiere einen effektiven Hamiltonoperator $H_{\rm eff}$ der nur auf dem Grundzustandsraum von H_0 operiert. Das niederenergetische Spektrum von $H_{\rm eff}$ soll mit dem von H_0 identisch sein. Sei dazu P die Projektion auf die Grundzustände von H_0. Die Konstruktion von $H_{\rm eff}$ ist nicht eindeutig. Nehmen wir an, wir hätten einen Ausdruck für $H_{\rm eff}$ gefunden. Dann können wir durch eine unitäre Transformation U im Grundzustandsraum von H_0 einen anderen effektiven Hamiltonoperator konstruieren. Alle so konstruierbaren effektiven Hamiltonoperatoren müssen unitär equivalent sein.

  Bisher näherungsweise $H_{\rm eff} = PH_{k_0}P$. Da in den Beispielen P mit den bosonischen Operatoren in H_{k_0} vertauscht, brauchten wir nur $P\sigma_x P$ oder $P\sigma_+ P$ zu berechnen. Diese Ausdrücke waren durch $F_0\sigma_x$ oder $F_0\sigma_+$ gegeben.
- Konstruiere R mit

$$(1-P)\psi = RP\psi \tag{2.39}$$

  für niedrigliegende Eigenzustände ψ von H_{k_c}.

$$R = RP \tag{2.40}$$

$$R = (1-P)R \tag{2.41}$$

  R kann nur für niedrig liegende Zustände konstruiert werden. Genauer, R kann nur für Zustände konstruiert werden, die sich beim Anschalten der Störung H_{k_0} aus den Grundzuständen von H_0 entwickeln. In diesem Sinn ist die Methode störungstheoretisch!
- Eigenwertgleichung von H_{k_c}:

$$E(1-P)\psi = (1-P)H_{k_c}(1-P)\psi + (1-P)H_{k_0}P\psi \tag{2.42}$$

$$EP\psi = PH_{k_0}(1-P)\psi + PH_{k_c}P\psi \tag{2.43}$$

  Multipliziere die zweite Glg. mit R und subtrahiere sie von der ersten

$$[(1-P)H_{k_c}R + (1-P)H_{k_0} - RPH_{k_0}R - RPH_{k_c}]P\psi = 0 \tag{2.44}$$

  Forderung

$$(1-P)H_{k_c}R + (1-P)H_{k_0} - RPH_{k_0}R - RPH_{k_c} = 0 \tag{2.45}$$

  mit $PH_0P = E_0P$

$$(E_0 - H_0)R = (1-P)H_{k_0}P + (1-P)H_{k_0}R - RH_{k_0}P - RH_{k_0}R \tag{2.46}$$

  oder

$$R = (E_0 - H_0)^{-1}(1-P-R)H_{k_0}(P+R) \tag{2.47}$$

  erlaubt rekursive Berechnung von R, Start $R = 0$. Diese Konstruktion von R konvergiert nur, wenn die Norm von H_{k_0} klein verglichen mit der Energielücke ΔE zwischen dem Grundzustand und den angeregten Zuständen von H_0 ist. Für die Konvergenz genügt z.B. $\|H_{k_0}\| < 0.2\Delta E$. Man erhält R als Limes der Folge R_n, die durch $R_0 = 0$, $R_{n+1} = (E_0 - H_0)^{-1}(1 - P - R_n)H_{k_0}(P + R_n)$ gegeben ist. Ich zeige $\|R_n\| < 0.4$. Diese Behauptung gilt für $n = 0$. Induktion: Sie gelte für n. Dann ist $\|R_{n+1}\| < (\Delta E)^{-1}(1.4)\,\|H_{k_0}\|\,(1.4) < 0.4$. Ebenso zeigt man $\|R_{n+1} - R_n\| \leq 0.4 \times 0.56^n$

- $EP\psi = [E_0 + PH_{k_0}P + PH_{k_0}R]P\psi$ (2.48)
  mit $H_{\text{eff}} = E_0 + PH_{k_0}P + PH_{k_0}R$. Noch nicht hermitesch! Außerdem: Sind ψ_1 und ψ_2 orthogonal, so nicht notwendig $P\psi_1$ und $P\psi_2$. Es gilt aber

  $$< (1 + R^\dagger R)^{1/2}P\psi_1|(1 + R^\dagger R)^{1/2}P\psi_2 >=< \psi_1|\psi_2 > \tag{2.49}$$

  wegen $P(1+R^\dagger R)P\psi = (P + R^\dagger RP)\psi = (P + R^\dagger(1-P))\psi = (P + R^\dagger)\psi$ für niedrig liegende Zustände ψ und $< \psi_1|(P + R^\dagger)\psi_2 >=< (P + R)\psi_1|\psi_2 >=< \psi_1|\psi_2 >$.
- Eigenwertgleichung:

  $$(E - H_{k_c})(P + R)P\psi = 0 \tag{2.50}$$

  Multiplikation mit $(P + R^\dagger)$

  $$E(P + R^\dagger)(P + R)P\psi = (P + R^\dagger)H_{k_c}(P + R)P\psi \tag{2.51}$$

  Mit $(P+R^\dagger)(P+R) = P+R^\dagger R = (1+R^\dagger R)P$ und Multiplikation mit $(1+R^\dagger R)^{-1/2}$ findet man

  $$E\phi = H_{\text{eff}}\phi \tag{2.52}$$

  $$\phi = (1 + R^\dagger R)^{1/2}P\psi \tag{2.53}$$

  $$H_{\text{eff}} = (1 + R^\dagger R)^{-1/2}(P + R^\dagger)H_{k_c}(P + R)(1 + R^\dagger R)^{-1/2} \tag{2.54}$$

  Dieser Ausdruck ist hermitesch und als Entwicklung in H_{k_0} definiert. Er ist als Potenzreihe in H_{k_0} definiert, wenn R als Potenzreihe existiert.

  $R = 0$ liefert das Resultat der Beispiele. Das ist die führende Ordnung

$$H_{\text{eff}} = PH_{k_c}P = E_0 + PH_{k_0}P \tag{2.55}$$

Berechnung der nächsten Ordnung:

$$R_1 = (E_0 - H_0)^{-1}(1 - P)H_{k_0}P \tag{2.56}$$

$$R_1^\dagger = PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-1} \tag{2.57}$$

$$(1 + R_1^\dagger R_1)^{-1/2} = 1 - \frac{1}{2}PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-2}(1 - P)H_{k_0}P + ... \tag{2.58}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= (1 + R_1^\dagger R_1)^{-1/2}(P + R_1^\dagger)H_{k_c}(P + R_1)(1 + R_1^\dagger R_1)^{-1/2} \\
&= E_0 + PH_{k_0}P + PH_{k_0}R_1 + R_1^\dagger H_{k_0}P \\
&\quad -E_0PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-2}(1 - P)H_{k_0}P + R_1^\dagger H_0R_1 \\
&= E_0 + PH_{k_0}P + PH_{k_0}(E_0 - H_0)^{-1}(1 - P)H_{k_0}P + PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-1}H_{k_0}P \\
&\quad -E_0PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-2}(1 - P)H_{k_0}P \\
&\quad +PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-1}H_0(E_0 - H_0)^{-1}(1 - P)H_{k_0}P \\
&= E_0 + PH_{k_0}P + PH_{k_0}(1 - P)(E_0 - H_0)^{-1}(1 - P)H_{k_0}P
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Man erkennt die für Störungsrechnung typische Struktur dieser Gleichungen [10]. Die hier vorgestellte Konstruktion hat den Vorteil, daß H_{eff} schnell in beliebiger Ordnung konstruiert werden kann.

Für realistische Modelle konvergieren die Potenzreihen nie. Typischerweise gilt $\Delta E \leq k_0$, da H_0 Anregungen mit dieser Energie enthält, und $\|H_{k_0}\| \geq k_0$, da H_{k_0} eine Anregung mit dieser Energie enthält. In den beiden Beispielen ist $\|H_{k_0}\| = \infty$. In höheren Ordnungen treten in H_{eff} höhere Wechselwirkungen auf, die in den Beispielen den Spin an zwei und mehr Bosonen koppeln. Höhere Ordnungen müssen abgeschätzt werden. Dabei treten kleine Energienenner und große Störungen auf! Die höheren Wechselwirkungen lassen sich für diese Modelle nicht abschätzen. Grund: Bosonische Anregungen. In fermionischen Modellen ist eine Abschätzung manchmal möglich, e.g. Kondoproblem. Höhere Wechselwirkungen können dann in relevante und irrelevante Operatoren eingeteilt werden. Auswege:

- Wähle ein Modell, in dem keine kleinen Energienenner auftreten. Ein Beispiel liefert Wilson [2]. Das ursprügliche Modell wird stark modifiziert (Diskretisierung des Spektrums, ...)

- Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren mit kontinuierlichen unitären Transformationen, Flußgleichungen [3], Anwendungen [11, 12, 13, 14]. Mit der Diagonalisierung wird das Renormierungsproblem mit erledigt.

- Konstruiere ein Renormierungsverfahren, daß kleine Energienenner explizit vermeidet. Das wurde von Glazek und Wilson vorgeschlagen [4] und später mit Hilfe von kontinuierlichen unitären Transformationen formuliert [5], Anwendung auf QCD [15].

- Deformiere das Spektrum in die komplexe Ebene. Dieses Verfahren erlaubt die mathematisch exakte Renormierung von einfachen Modellen. Auf das Spin–Boson Modell wurde dieses Verfahren von Bach et al [16] angewandt (allgemeinere Modelle für Atom im Strahlungsfeld).

Was ist konzeptionell geschehen? Ausgangspunkt war

$$\begin{aligned} H_{k_c} &= H_0 + H_{k_0} \\ &= PH_0P + QH_0Q + PH_{k_0}P + QH_{k_0}Q + PH_{k_0}Q + QH_{k_0}P \\ &= \begin{pmatrix} PH_0P + PH_{k_0}P & PH_{k_0}Q \\ QH_{k_0}P & QH_0Q + QH_{k_0}Q \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.60}$$

mit $Q = 1 - P$. Dieser Ausdruck wird formal in eine blockdiagonale Form transformiert:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} PH_0P + PH_{k_0}P & PH_{k_0}Q \\ QH_{k_0}P & QH_0Q + QH_{k_0}Q \end{pmatrix} &\to U^\dagger \begin{pmatrix} PH_0P + PH_{k_0}P & PH_{k_0}Q \\ QH_{k_0}P & QH_0Q + QH_{k_0}Q \end{pmatrix} U \\ &= \begin{pmatrix} PH_{\text{eff}}P & 0 \\ 0 & Q\tilde{H}_{\text{eff}}Q \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.61}$$

Nur der Teil $PH_{\text{eff}}P$ ist interessant, da er die niedrig liegenden Anregungen beschreibt.

Mit einem Ansatz

$$U = \exp(T), \quad T^\dagger = -T \tag{2.62}$$

kann die obige Reihe für $PH_{\text{eff}}P$ rekonstruiert werden. Dazu schreibt man $U^\dagger H_{k_c} U$ als Reihe iterierter Kommutatoren und wählt T in erster Ordnung so, daß $[T, H_0] = PH_{k_0}Q + QH_{k_0}P$, also

$PTQ = -PH_{k_0}Q(E_0 - H_0)^{-1}$, $QTP = (E_0 - H_0)^{-1}QH_{k_0}P$. Man kann $PTP = 0$ und $QTQ = 0$ wählen. Damit gilt

$$\begin{aligned}
U^\dagger H_{k_c} U &= H_0 + H_{k_0} - [T, H_0] - [T, H_{k_0}] + \frac{1}{2}[T[T, H_0]] + O(H_{k_0}^3) \\
&= H_0 + PH_{k_0}P + QH_{k_0}Q - \frac{1}{2}[T, H_{k_0}] + O(H_{k_0}^3) \\
&= H_0 + PH_{k_0}p + QH_{k_0}Q \\
&\quad -\frac{1}{2}(PTQH_{k_0}P - PH_{k_0}QTP + QTPH_{k_0}Q - QH_{k_0}PTQ) + O(H_{k_0}^3) \\
&= E_0P0 + PH_{k_0}P + QH_{k_0}Q + PH_{k_0}Q(E_0 - H_0)^{-1}QH_{k_0}P \\
&\quad +\frac{1}{2}QH_{k_0}PH_{k_0}Q(E_0 - H_0)^{-1} + \frac{1}{2}(E_0 - H_0)^{-1}QH_{k_0}PH_{k_0}Q + O(H_{k_0}^3)
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Das ist der gleiche Ausdruck wie vorher. Die höheren Ordnungen sind auf diese Weise nur sehr schwierig zu bestimmen. Gilt $k_0 = k_c - \Delta k_c$, Δk_c klein, so ist $T = \eta(k_c)\Delta k_c$ und man erhält

$$U^\dagger H_{k_c} U = H_{\text{eff}} = H_{k_c} - [\eta(k_c), H_{k_c}]\Delta k_c \tag{2.64}$$

Mit der Notation $H_{\text{eff}} = H(k_c - \Delta k_c)$, $H_{k_c} = H(k_c)$ findet man

$$\frac{dH(k_c)}{dk_c} = [\eta(k_c), H_{k_c}] \tag{2.65}$$

Die Renormierung kann also als kontinuierliche unitäre Transformation geschrieben werden. Das gilt natürlich nur, wenn das Spektrum kontinuierlich ist! Für diskrete Spektren (Matrizen) geschieht hier formal das Folgende. Ausgangspunkt ist eine Matrix

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \tag{2.66}$$

wobei ich annehme, daß $H_{11} < H_{22} < ... < H_{nn}$. Im ersten Renormierungsschritt wird der Zustand mit Index n behandelt. die Matrix wird auf eine Form

$$H^{(1)} = \begin{pmatrix} H_{11}^{(1)} & \cdots & H_{1n-1}^{(1)} & 0 \\ H_{21}^{(1)} & \cdots & H_{2n-1}^{(1)} & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & H_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \tag{2.67}$$

transformiert. Im nächsten Schritt wird der Zustand mit Index $n-1$ ebenso behandelt, etc. Wäre diese Prozedur exakt durchführbar, so hätte man nach n Schritten die Matrix diagonalisiert.

Bemerkung zum nichtkontinuierlichen Verfahren, Äquivalenz, ...

Beispiel: 3×3–Matrix.

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \alpha_3 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & \epsilon_2 & \alpha_1 \\ \alpha_2 & \alpha_1 & \epsilon_3 \end{pmatrix} \tag{2.68}$$

mit $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$. Das oben beschriebene Verfahren würde zunächst α_1 und α_2 eliminieren. Elimination von α_1:

$$U^\dagger H U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & u & v \\ 0 & -v & u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \alpha_3 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & \epsilon_2 & \alpha_1 \\ \alpha_2 & \alpha_1 & \epsilon_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & u & -v \\ 0 & v & u \end{pmatrix} \tag{2.69}$$

mit $u = \cos\phi$, $v = \sin\phi$. α_1 wird eliminiert falls $\tan 2\phi = \frac{2\alpha_1}{\epsilon_2 - \epsilon_3}$. Solange diese Rechnung wie im Fall der 3×3–Matrix exakt durchgeführt werden kann, spielt es keine Rolle, in welcher Reihenfolge die außerdiagonalen Matrixelemente eliminiert werden. Normalerweise kann man die Rechnung nicht exakt durchführen. Für die Störungstheoretische Behandlung wie für die numerische Behandlung ist es wichtig, daß der Winkel ϕ klein ist. Dann hat man keine kleinen Energienenner! Das oben beschriebene Renormierungsverfahren (Moden mit hohen Energien werden zuerst eliminiert) ist nicht sinnvoll, wenn z.B. $\epsilon_1 \ll \epsilon_2 \lessapprox \epsilon_3$. Möchte man einen Hamiltonoperator diagonalisieren, so sollten zuerst Matrixelemente eliminiert werden, die zu großen Energiedifferenzen gehören, dann die zu kleineren Energiedifferenzen. Diese Idee ist die Grundlage für die Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren mit Flußgleichungen wie von Wegner vorgeschlagen [3] und für das neue Renormierungsverfahren von Glazek und Wilson [5].

Kapitel 3

Kontinuierliche unitäre Transformationen: Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren

Im vorangegangenen Kapitel haben wir gesehen, daß die Renormierung eines Hamiltonoperators (im Fall kontinuierlicher Spektren) als kontinuierliche unitäre Transformation geschrieben werden kann. Diese Transformation kann in der Regel nur approximativ durchgeführt werden. Der Hamiltonoperator wird dabei in eine blockdiagonale Form gebracht und der Teil, der die niedrig liegenden Anregungen enthält wird als effektiver Hamiltonoperator benutzt. Dieser Schritt wird mehrfach (kontiniuerlich) durchgeführt und man erhält am Ende einen renormierten Hamiltonoperator mit einem erniedrigten Abschneideparameter. Ein Problem, das dabei auftritt, sind Energienenner, die von der Größenordnung des erniedrigten Abschneideparameters sind. Dieses Problem kann behoben werden, wenn man zuerst die Matrixelemente eliminiert, die zu großen Energiedifferenzen gehören. Diese Kriterium sorgt auch bei der numerischen Diagonalisierung einer Matrix für die Konvergenz. Dem von Wegner vorgeschlagenem Verfahren, einen Hamiltonoperator H oder eine Matrix H mit einer kontinuierlichen unitären Tranformation zu diagonalisieren, [3] liegt die gleiche Idee zugrunde. Dieses Verfahren, seine Anwendung auf Beipiele und sein Zusammenhang mit Renormierung von Hamiltonoperatoren soll in diesem Kapitel dargestellt werden.

3.1 Kontinuierliche unitäre Transformationen für Matrizen

Eine kontinuierliche unitäre Transformation hängt von einen Parameter ℓ ab. Sie kann als $U(\ell)$ notiert werden. Ich nehme im folgenden an, daß $U(0) = 1$ gilt und daß $U(\infty)$ den vorgegebenen Hamiltonoperator H oder die vorgegebene Matrix H diagonalisiert. Durch die Transformation wird H von ℓ abhängen,

$$H(\ell) = U^\dagger(\ell) H U(\ell). \tag{3.1}$$

Wäre die Transformation $U(\ell)$ bekannt, so könnte man $H(\infty)$ bestimmen und das Problem wäre gelöst. In der Regel kennt man die Transformation nicht, die einen vorgegebene Matrix diagonalisiert.Es ist deshalb sinnvoll, die Transformation infinitesimal zu formulieren.

$$\frac{dH(\ell)}{d\ell} = [\eta(\ell), H(\ell)]. \tag{3.2}$$

Hierbei ist η die Erzeugende der Transformation. η ist antihermitesch, $\eta^\dagger = -\eta$. Für die Matrixelemente erhält man

$$\frac{dh_{k,q}(\ell)}{d\ell} = \sum_p (\eta_{k,p}(\ell) h_{p,q}(\ell) - h_{k,p}(\ell)\eta_{p,q}(\ell)) \tag{3.3}$$

η soll so gewählt werden, daß die Matrix mit steigendem η immer diagonaler wird. Ein Kriterium ist zu fordern, daß $\sum_{k\neq q} h_{k,q}^2$ monoton fällt. $H = H_d + H_r$, $H_d = \mathrm{diag}(H)$.

$$\mathrm{Tr} H_d^2 + \mathrm{Tr} H_r^2 = \mathrm{Tr} H^2 = \text{konstant} \tag{3.4}$$

$\sum_{k\neq q} h_{k,q}^2 = \mathrm{Tr} H_r^2$ fällt monoton, wenn $\mathrm{Tr} H_d^2$ monoton steigt.

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathrm{Tr} H_d^2}{d\ell} &= \frac{d}{d\ell} \sum_q h_{q,q}^2 \\
&= 2\sum_q h_{q,q} \sum_p (\eta_{q,p} h_{p,q} - h_{q,p}\eta_{p,q}) \\
&= 2\sum_{p,q} \eta_{p,q} h_{p,q} (h_{p,p} - h_{q,q})
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Die rechte Seite soll nicht negativ sein. Eine mögliche Wahl von $\eta_{p,q}$ ist $\eta_{p,q} = h_{p,q}(h_{p,p} - h_{q,q})$ oder

$$\eta = [H_d, H_r]. \tag{3.6}$$

$$\frac{dh_{k,q}(\ell)}{d\ell} = \sum_p (h_{k,k}(\ell) + h_{q,q}(\ell) - 2h_{p,p}(\ell)) h_{k,p}(\ell) h_{p,q}(\ell). \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\ell} \sum_{k\neq q} h_{k,q}^2 &= -\frac{d}{d\ell} \sum_k h_{k,k}^2 \\
&= -2\sum_{k,q} (h_{k,k} - h_{q,q})^2 h_{k,q}^2 \\
&= -2\sum_{k,q} \eta_{k,q}^2
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Da $\sum_{k\neq q} h_{k,q}^2$ monoton fällt und beschränkt ist, muß die Ableitung im Limes $\ell \to \infty$ verschwinden, es gilt also

$$\eta(\ell) = [H_d, H] \to_{\ell\to\infty} 0 \tag{3.9}$$

Wir haben das Ziel also fast erreicht, die Matrix kommutiert für $\ell \to \infty$ mit ihrem Diagonalteil.

3.1.1 2×2–Matrix

Um ein Gefühl für die Gleichungen zu bekommen, ist es nützlich, zunächst kleine Matrizen zu betrachten. Als erstes die 2×2–Matrix

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & v \\ v & \epsilon_2 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

Für η erhält man

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & v(\epsilon_1 - \epsilon_2) \\ v(\epsilon_2 - \epsilon_1) & 0 \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

Es gilt

$$[\eta, H] = \begin{pmatrix} 2v^2(\epsilon_1 - \epsilon_2) & -v(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 \\ -v(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 & 2v^2(\epsilon_2 - \epsilon_1) \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

Flußgleichungen

$$\frac{d\epsilon_1}{d\ell} = 2v^2(\epsilon_1 - \epsilon_2) \tag{3.13}$$

$$\frac{d\epsilon_2}{d\ell} = 2v^2(\epsilon_2 - \epsilon_1) \tag{3.14}$$

$$\frac{dv}{d\ell} = -v(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 \tag{3.15}$$

Die Größe $\epsilon_1 + \epsilon_2 = \mathrm{Tr}H$ ist eine Konstante, ebenso $C \overset{\mathrm{def}}{=} 2\mathrm{Tr}(H - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}H)^2 = (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4v^2$.

$$\frac{d}{d\ell}(\epsilon_1 - \epsilon_2) = 4v^2(\epsilon_1 - \epsilon_2) \tag{3.16}$$

$$\frac{dC}{d\ell} = 8v^2(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 - 8v^2(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 = 0 \tag{3.17}$$

Daraus ergibt sich

$$\frac{dv}{d\ell} = -v(C - 4v^2) \tag{3.18}$$

$$\frac{dv^2}{d\ell} = -2v^2(C - 4v^2) \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned} \ell &= \int_{v^2(0)}^{v^2(\ell)} \frac{dx}{8x^2 - 2C} \\ &= \frac{1}{2C} \ln(1 - \frac{C}{4x})\Big|_{v^2(0)}^{v^2(\ell)} \\ &= \frac{1}{2C} \ln \frac{1 - \frac{C}{4v^2(\ell)}}{1 - \frac{C}{4v^2(0)}} \end{aligned} \tag{3.20}$$

$$v^2(\ell) = \frac{Cv^2(0)}{Ce^{2C\ell} - 4v^2(0)(e^{2C\ell} - 1)} \tag{3.21}$$

Für große ℓ zerfällt $v \propto e^{-C\ell}$. Es gilt $C = (\epsilon_1(\infty) - \epsilon_2(\infty))^2$. Das ist das typische Verhalten. Im allgemeinen Fall gilt

$$\frac{dh_{k,q}}{d\ell} = -(h_{k,k} - h_{q,q})^2 h_{k,q} + \sum_{p \neq k,q} (h_{k,k}(\ell) + h_{q,q}(\ell) - 2h_{p,p}(\ell)) h_{k,p}(\ell) h_{p,q}(\ell). \tag{3.22}$$

Der zweite Term enthält zwei außerdiagonale Matrixelemente und ist damit typischerweise klein für große ℓ. Der erste Term liefert den asymptotischen Zerfall

$$h_{k,q} \propto \exp(-(h_{k,k}(\infty) - h_{q,q}(\infty))^2 \ell) \tag{3.23}$$

Der Zerfall wird umso langsamer, je kleiner die Differenz $h_{k,k}(\infty) - h_{q,q}(\infty)$ wird. Was passiert bei Entartungen? Im Fall der 2×2–Matrix ist dann $\eta = 0$. Dieser Fall kann also nur an der 3×3–Matrix diskutiert werden.

3.1.2 3×3–Matrix

Für eine 3×3–Matrix

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & v_3 & v_2 \\ v_3 & \epsilon_2 & v_1 \\ v_2 & v_1 & \epsilon_3 \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

lauten die Flußgleichungen

$$\frac{d\epsilon_1}{d\ell} = 2v_2^2(\epsilon_1 - \epsilon_3) + 2v_3^2(\epsilon_1 - \epsilon_2) \tag{3.25}$$

und zyklisch

$$\frac{d\epsilon_2}{d\ell} = 2v_3^2(\epsilon_2 - \epsilon_1) + 2v_1^2(\epsilon_2 - \epsilon_3) \tag{3.26}$$

$$\frac{d\epsilon_3}{d\ell} = 2v_1^2(\epsilon_3 - \epsilon_2) + 2v_2^2(\epsilon_3 - \epsilon_1) \tag{3.27}$$

und für die außerdiagonalen Matrixelemente

$$\frac{v_1}{d\ell} = -v_1(\epsilon_2 - \epsilon_3)^2 - v_2 v_3(2\epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3) \tag{3.28}$$

und zyklisch

$$\frac{v_2}{d\ell} = -v_2(\epsilon_1 - \epsilon_3)^2 - v_1 v_3(2\epsilon_2 - \epsilon_1 - \epsilon_3) \tag{3.29}$$

$$\frac{v_3}{d\ell} = -v_3(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 - v_1 v_1(2\epsilon_3 - \epsilon_1 - \epsilon_2) \tag{3.30}$$

Es gibt in diesem Fall 6 gekoppelte Differentialgleichungen, aber nur 3 unabhängige Integrale, $\mathrm{Tr}H$, $\mathrm{Tr}H^2$ und $\mathrm{Tr}H^3$. Dieses Gleichungssystem kann also nicht durch Quadratur gelöst werden. Numerische Integration für drei Beipiele

Bild 1: Startwerte:

$$\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 3, \epsilon_3 = 2,5, v_1 = 1,8478, v_2 = 0,7654, v_3 = 1$$

ϵ_1 und ϵ_3 kommen sich nahe, während ϵ_2 sehr groß wird. Daher gehen v_1 und v_3 schnell gegen 0, während die Konvergenz für v_2 langsam ist.

Bild 2: Startwerte:

$$\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 3, \epsilon_3 = 2, v_1 = 1,8478, v_2 = 1, v_3 = 1$$

ϵ_1 und ϵ_3 kommen sich sehr nahe, während ϵ_2 wieder sehr groß wird. Daher gehen v_1 und v_3 schnell gegen 0, während die Konvergenz für v_2 noch viel langsamer ist, als vorher.

Bild 3: Startwerte:

$$\epsilon_1 = 1, \epsilon_2 = 3, \epsilon_3 = 2, v_1 = 1,8478, v_2 = 0,7654, v_3 = 1$$

ϵ_1 und ϵ_3 sind entartet. v_1 und v_3 gehen wie vorher schnell gegen 0, die Konvergenz für v_2 ist wider Erwarten noch schneller.

Dieses Verhalten scheint generisch zu sein! Warum erhält man bei Entartung eine schnellere Konvergenz? Ich nehme o.B.d.A. an, daß $\epsilon_1 - \epsilon_2 \to_{\ell\to\infty} 0$ gilt. Sei $\delta = \epsilon_1 - \epsilon_2$, $\tilde{\epsilon} = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2)$. Dann gilt

$$\frac{d\delta}{d\ell} = \delta(4v_3^2 + v_1^2 + v_2^2) + 2(v_2^2 - v_1^2)(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3) \tag{3.31}$$

$$\frac{dv_1}{d\ell} = -v_1(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3 - \frac{1}{2}\delta)^2 - v_2 v_3(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3 + \frac{3}{2}\delta) \tag{3.32}$$

$$\frac{dv_2}{d\ell} = -v_2(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3 + \frac{1}{2}\delta)^2 - v_1 v_3(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3 - \frac{3}{2}\delta) \tag{3.33}$$

$$\frac{dv_3}{d\ell} = -v_3\delta^2 + 2v_1 v_2(\tilde{\epsilon} - \epsilon_3) \tag{3.34}$$

Ich möchte die Frage untersuchen, was bei einer Entartung passiert. Dazu nehme ich an, daß für große ℓ die Differenz $\Delta \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\epsilon} - \epsilon_3 \gg \delta$ ist. In guter Näherung kann man dann annehmen, daß Δ nicht mehr von ℓ abhängt. Die vier Gleichungen lauten dann

$$\frac{dv_1}{d\ell} = -v_1\Delta^2 - v_2 v_3\Delta \tag{3.35}$$

$$\frac{dv_2}{d\ell} = -v_2\Delta^2 - v_1 v_3\Delta \tag{3.36}$$

$$\frac{dv_3}{d\ell} = -v_3\delta^2 + 2v_1 v_2\Delta \tag{3.37}$$

$$\frac{d\delta}{d\ell} = \delta(4v_3^2 + v_1^2 + v_2^2) + 2(v_2^2 - v_1^2)\Delta \tag{3.38}$$

Damit gilt

$$\frac{d}{d\ell}(v_1^2 + v_2^2) = -2(v_1^2 + v_2^2)\Delta^2 - 4v_1 v_2 v_3\Delta \tag{3.39}$$

$$\frac{d}{d\ell}v_3^2 = -2v_3^2\delta^2 + 4v_1 v_2 v_3\Delta \tag{3.40}$$

Wie zu erwarten nimmt $v_1^2 + v_2^2 + v_3^2$ monoton ab. Außerdem gilt

$$\frac{d}{d\ell}(v_1^2 - v_2^2) = -2(v_1^2 - v_2^2)\Delta^2 \tag{3.41}$$

so daß $v_1^2 - v_2^2 \propto \exp(-2\Delta^2\ell)$ für große ℓ. Fordert man, daß $\delta \to 0$ für $\ell \to \infty$, dann gilt

$$\delta = 2\int_\ell^\infty d\ell'(v_1^2 - v_2^2)\Delta\exp(-\int_\ell^{\ell'} d\ell''(4v_3^2 + v_1^2 + v_2^2)) \tag{3.42}$$

Fallunterscheidung:

Fall 1: Entartung: $v_3 \to 0$.
Dann gilt $v_1 \propto \exp(-\Delta^2\ell)$, $v_2 \propto \exp(-\Delta^2\ell)$ und damit $v_3 \propto \exp(-2\Delta^2\ell)$, $\delta \propto \exp(-2\Delta^2\ell)$. Dieses Verhalten entspricht der Numerik!

Fall 2: keine Entartung: $v_3 \to v_3(\infty) \neq 0$.
v_1 und v_2 fallen $\propto \exp(-\lambda^2 \ell)$ mit $\lambda^2 = \min(\Delta(\Delta \pm v_3(\infty)))$. Offenbar muß $|v_3(\infty)| < |\Delta|$ gelten. Dieser Fall tritt nur für bestimmte Anfangsbedingungen auf und ist instabil. Eine kleine Änderung in den Anfangsbedingungen führt zu $v_3 \to 0$.

Damit ist gezeigt, daß im generischen Fall die Flußgleichungen gegen eine Diagonalmatrix konvergieren. Außnahmen treten auf, sind aber gegenübner kleinen Abweichungen in den Anfangswerten instabil. In allen Fällen ist die Konvergenz exponentiell.

Eine entsprechende Diskussion kann für die $N \times N$–Matrix durchgeführt werden. Es gilt

$$\frac{dh_{k,q}(\ell)}{d\ell} = \sum_p (h_{k,k}(\ell) + h_{q,q}(\ell) - 2h_{p,p}(\ell))h_{k,p}(\ell)h_{p,q}(\ell). \tag{3.43}$$

und damit

$$\frac{d}{d\ell}\sum_k h_{k,k}^2 = 2\sum_{k,q}(h_{k,k} - h_{q,q})^2 h_{k,q}^2 \tag{3.44}$$

Ich nehme wieder an, daß $\delta = h_{11} - h_{22}$ gegen 0 geht. Als Flußgleichung für δ hat man

$$\frac{d\delta}{d\ell} = \delta(4h_{12}^2 + \sum_{q>3}(h_{1q}^2 + h_{2q}^2)) + \sum_q (h_{11} + h_{22} - 2h_{q,q})(h_{1q}^2 - h_{2q}^2) \tag{3.45}$$

Diese Gleichung ist von der Form

$$\frac{d\delta}{d\ell} = \delta a + b. \tag{3.46}$$

Fordert man $\delta \to 0$, so erhält man als Lösung

$$\delta = -\int_\ell^\infty d\ell' b \exp(-\int_\ell^{\ell'} d\ell'' a). \tag{3.47}$$

δ zerfällt asymptotisch wie b, auch dann, wenn a gegen einen konstanten Wert $a(\infty)$ geht. Ferner gilt

$$\frac{dh_{12}}{d\ell} = -h_{12}\delta^2 + \sum_q (h_{11} + h_{22} - 2h_{q,q})h_{1q}h_{2q} \tag{3.48}$$

Damit muß $h_{12} - h_{12}(\infty)$ für große ℓ wie $\sum_q (h_{11} + h_{22} - 2h_{q,q})h_{1q}h_{2q}$ abfallen, also exponentiell.

3.1.3 Störungsrechnung für die $N \times N$–Matrix

Die Flußgleichungen für eine $N \times N$–Matrix können iterativ gelöst werden, wenn die außerdiagonalen Matrixelemente klein sind. Als Startfunktionen nimmt man $h_{k,k} = h_{k,k}^{(1)}(0)$ und

$$h_{k,q}^{(1)} = h_{k,q}(0)\exp(-(h_{k,k}(0) - h_{q,q}(0))^2 \ell). \tag{3.49}$$

Der n–te Iterationsschritt ist

$$\frac{dh_{k,q}^{(n+1)}}{d\ell} = -h_{k,q}^{(n+1)}(h_{k,k}^{(n)} - h_{q,q}^{(n)})^2 + \sum_{p\neq k,q}(h_{k,k}^{(n)} + h_{q,q}^{(n)} - 2h_{p,p}^{(n)})h_{k,p}^{(n)}h_{p,q}^{(n)}. \tag{3.50}$$

Für $n = 2$ hat man

$$\begin{aligned} h^{(2)}_{k,q} &= h^{(2)}_{k,q}(0)\exp(-(h_{k,k}(0)-h_{q,q}(0))^2\ell) \\ &\quad + \sum_{p\neq k,q} \frac{h_{k,k}(0)+h_{q,q}(0)-2h_{p,p}(0)}{(h_{k,k}(0)-h_{p,p}(0))^2+(h_{q,q}(0)-h_{p,p}(0))^2-(h_{k,k}(0)-h_{q,q}(0))^2} \\ &\qquad h_{k,p}(0)h_{p,q}(0)\left[\exp\left(-(h_{k,k}(0)-h_{q,q}(0))^2\ell\right)\right. \\ &\qquad\quad \left. -\exp\left(-\left((h_{k,k}(0)-h_{p,p}(0))^2+(h_{q,q}(0)-h_{p,p}(0))^2\right)\ell\right)\right] \end{aligned} \tag{3.51}$$

$$h^{(2)}_{k,k}(\infty) = h^{(2)}_{k,k}(0) + \sum_p \frac{h_{k,p}(0)h_{p,k}(0)}{h_{k,k}(0)-h_{p,p}(0)} \tag{3.52}$$

Das sind typische störungstheoretische Resultate.

Diese störungstheoretischen Resultate liefern das falsche asymptotische Verhalten. Das kann korrigiert werden, wenn man als Startfunktionen $h^{(1)}_{k,k} = h_{k,k}(\infty)$ und

$$h^{(1)}_{k,q} = h_{k,q}(0)\exp(-(h_{k,k}(\infty)-h_{q,q}(\infty))^2\ell). \tag{3.53}$$

nimmt. Für $n = 2$ hat man analog zu vorher

$$\begin{aligned} h^{(2)}_{k,q} &= h^{(2)}_{k,q}(0)\exp(-(h_{k,k}(\infty)-h_{q,q}(\infty))^2\ell) \\ &\quad + \sum_{p\neq k,q} \frac{h_{k,k}(\infty)+h_{q,q}(\infty)-2h_{p,p}(\infty)}{(h_{k,k}(\infty)-h_{p,p}(\infty))^2+(h_{q,q}(\infty)-h_{p,p}(\infty))^2-(h_{k,k}(\infty)-h_{q,q}(\infty))^2} \\ &\qquad h_{k,p}(0)h_{p,q}(0)\left[\exp\left((h_{k,k}(\infty)-h_{q,q}(\infty))^2\ell\right)\right. \\ &\qquad\quad \left. -\exp\left(-\left((h_{k,k}(\infty)-h_{p,p}(\infty))^2+(h_{q,q}(\infty)-h_{p,p}(\infty))^2\right)\ell\right)\right] \end{aligned} \tag{3.54}$$

für $k \neq q$ und

$$h^{(2)}_{k,k} = h_{k,k}(\infty) - \sum_{p\neq k} \frac{h_{k,p}(0)h_{p,k}(0)}{h_{k,k}(\infty)-h_{p,p}(\infty)}\exp(-2(h_{k,k}(\infty)-h_{p,p}(\infty))^2\ell) \tag{3.55}$$

$h_{k,k}(\infty)$ kann daraus selbstkonsistent mit $\ell = 0$ bestimmt werden.

$$h_{k,k}(0) = h_{k,k}(\infty) - \sum_{p\neq k} \frac{h_{k,p}(0)h_{p,q}(0)}{h_{k,k}(\infty)-h_{p,p}(\infty)} \tag{3.56}$$

3.2 Störstelle in einem Band

Bisher wurde nur untersucht, wie sich Matrizen mit Hilfe von Flußgleichungen diagonalisieren lassen, wie das Konvergenzverhalten ist, und was bei Entartungen passiert. Wir haben gesehen, daß $H(\ell)$ immer exponentiell gegen $H(\infty)$ konvergiert. Was geschieht für den Fall, in dem H ein kontinuierliches Spektrum hat. Der folgende Hamiltonoperator ist ein einfaches Beispiel, an dem diese Frage diskutiert werden kann.

$$H = \sum_k \epsilon_k c^\dagger_k c_k + \epsilon_d d^\dagger d + \sum_k V_k(c^\dagger_k d + d^\dagger c_k) \tag{3.57}$$

$c^\dagger_k$ und c_k sind elektronische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Elektronen in einem Band mit einer Dispersion ϵ_k. An dieses Band ist eine Störstelle der Energie ϵ_d gekoppelt, $d^\dagger$ und d sind die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die Hybridisierung zwischen den Bandzuständen und dem Störstellenzustand ist durch V_k gegeben. Der Hamiltonoperator ist exakt lösbar. Er spielt eine gewisse Rolle für das Kondoproblem (Toulouse-Limes). Für die Erzeugende der unitären Transformation wähle ich

$$\eta \quad = \quad \sum_k \eta_k (c_k^\dagger d - d^\dagger c_k) + \sum_{k,q} \eta_{k,q} (c_k^\dagger c_q - c_q^\dagger c_k) \tag{3.58}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} [\eta, H] \quad = \quad & \sum_k \eta_k (\epsilon_d - \epsilon_k)(c_k^\dagger d + d^\dagger c_k) \\ + \quad & \sum_{k,q} \eta_k V_q (c_k^\dagger c_q + c_q^\dagger c_k) \\ - \quad & 2 \sum_k \eta_k V_k d^\dagger d \\ - \quad & \sum_{k,q} \eta_{k,q} (\epsilon_k - \epsilon_q)(c_k^\dagger c_q + c_q^\dagger c_k) \\ + \quad & 2 \sum_{k,q} \eta_{k,q} V_q (d^\dagger c_k + c_k^\dagger d). \end{aligned} \tag{3.59}$$

In $[\eta, H]$ treten Terme auf, die Operatoren $c_k^\dagger c_q + c_q^\dagger c_k$ enthalten. Diese Terme waren im ursprünglichen Hamiltonoperator nicht vorhanden. Das ist ein typisches Problem der Flußgleichungen. Es werden neue Wechselwirkungen generiert. In fast allen Fällen müssen geeignete Näherungen gefunden werden, mit denen die neuen Wechselwirkungen behandelt werden können. Dieses Problem ist analog zu den neuen Operatoren, die unter Renormierungstransformationen erzeugt werden. Dazu später. Im vorliegenden Fall kann man durch die Wahl

$$\eta_{k,q}(\epsilon_k - \epsilon_q) = \frac{1}{2}(\eta_k V_q + \eta_q V_k) \tag{3.60}$$

vermeiden, daß diese Terme auftreten. Diese Wahl von $\eta_{k,q}$ entspricht nicht der ursprünglichen Wahl $\eta = [H_d, H]$. Wir sind aber in der Wahl von η nicht festgelegt. Eine andere Wahl von η ist in diesem Fall nützlich, da dadurch der Hamiltonoperator forminvariant bleibt. Entsprechend der ursprünglichen Wahl $\eta = [H_d, H]$ kann aber der Parameter η_k festgelegt werden,

$$\eta_k = V_k(\epsilon_k - \epsilon_d) \tag{3.61}$$

Die Flußgleichungen lauten dann

$$\frac{dV_k}{d\ell} = -V_k(\epsilon_d - \epsilon_k)^2 + \sum_p V_k V_p^2 \frac{\epsilon_k + \epsilon_p - 2\epsilon_d}{\epsilon_k - \epsilon_p} \tag{3.62}$$

$$\frac{d\epsilon_k}{d\ell} = 2V_k^2(\epsilon_k - \epsilon_d) \tag{3.63}$$

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = 2\sum_k V_k^2(\epsilon_d - \epsilon_k) \tag{3.64}$$

Man erkennt, daß TrH erhalten ist, da $\frac{d}{d\ell}(\sum_k \epsilon_k + \epsilon_d) = 0$ gilt. Für eine große Zahl von Zuständen N im Band gilt $V_k \propto N^{-1/2}$. Daher muß η_k ebenfalls von der Ordnung $N^{-1/2}$ sein. Damit ändern sich die Bandenergien ϵ_k nur um $O(N^{-1})$, die Ableitung von ϵ_k kann im Limes $N \to \infty$ vernachlässigt werden. Ich führe die Funktion

$$J(\epsilon, \ell) = \sum_k V_k^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k) \tag{3.65}$$

ein. Die Flußgleichungen für ϵ_d und $J(\epsilon, \ell)$ sind

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = 2 \int d\epsilon (\epsilon_d - \epsilon) J(\epsilon, \ell) \tag{3.66}$$

$$\frac{\partial J(\epsilon, \ell)}{\partial \ell} = -2J(\epsilon, \ell)(\epsilon_d - \epsilon)^2 + 2 \int d\epsilon' \frac{J(\epsilon, \ell) J(\epsilon', \ell)(\epsilon + \epsilon' - 2\epsilon_d)}{\epsilon - \epsilon'}. \tag{3.67}$$

Der Integration über ϵ' war vorher eine Summe über $q \neq k$. Daher ist das Integral als Hauptwertintegral zu interpretieren. Im vorliegenden Fall sind die Flußgleichungen geschlossen, es treten keine weiteren neuen Kopplungen im Hamiltonoperator auf. Das ist typischerweise nicht der Fall. Wenn andere Kopplungen auftreten und diese nur näherungsweise behandelt werden, kann das Auftreten von vergleichbaren Energienennern Probleme bereiten. Ich konstruiere zunächst eine Näherungslösung

3.2.1 Näherungslösung

Vernachlässigt man den zweiten Term in der Gleichung für $J(\epsilon, \ell)$, so hat man

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = 2 \int d\epsilon (\epsilon_d - \epsilon) J(\epsilon, \ell) \tag{3.68}$$

$$\frac{\partial J(\epsilon, \ell)}{\partial \ell} = -2J(\epsilon, \ell)(\epsilon_d - \epsilon)^2 \tag{3.69}$$

und damit

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = -\int d\epsilon \frac{\partial J(\epsilon, \ell)}{\partial \ell} \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon} \tag{3.70}$$

Nimmt man außerdem an, daß ϵ_d schnell gegen $\epsilon_d(\infty)$ konvergiert, dann kann man in der letzten Gleichung ϵ_d auf der rechten Seite durch $\epsilon_d(\infty)$ ersetzen. Das entspricht der iterativen Lösung für die Flußgleichungen von Matrizen, die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellt wurde. Jetzt kann die Gleichung integriert werden und man erhält mit der Annahme $J(\epsilon, \infty) = 0$

$$\epsilon_d = \epsilon_d(\infty) - \int d\epsilon \frac{J(\epsilon, \ell)}{\epsilon_d(\infty) - \epsilon} \tag{3.71}$$

Für $\ell = 0$ ergibt sich die Selbstklonsistenzbedingung, aus der $\epsilon_d(\infty)$ bestimt werden muß.

3.2.2 Exakte Lösung

Für die exakte Lösung konstruiert man sich die Funktion

$$F(z, \ell) = \frac{\det(z - H)}{\det(z - H_{\text{Band}})} \tag{3.72}$$

Diese Funktion hat bei $z = \epsilon_d(\infty)$ eine Nullstelle. Die einfache Form von H liefert

$$F(z, \ell) = z - \epsilon_d - \int d\epsilon \frac{J(\epsilon, \ell)}{z - \epsilon} \tag{3.73}$$

Leitet man diese Größe nach ℓ ab, so findet man

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F(z,\ell)}{\partial \ell} &= 2\int d\epsilon(\epsilon-\epsilon_d)J(\epsilon,\ell)+2\int d\epsilon\frac{J(\epsilon,\ell)(\epsilon_d-\epsilon)^2}{z-\epsilon} \\
&\quad -2\int d\epsilon d\epsilon'\frac{J(\epsilon,\ell)J(\epsilon',\ell)(\epsilon+\epsilon'-2\epsilon_d)}{(\epsilon-\epsilon')(z-\epsilon)} \\
&= 2F(z,\ell)\int d\epsilon\frac{J(\epsilon,\ell)(\epsilon-\epsilon_d)}{z-\epsilon}
\end{aligned} \tag{3.74}
$$

Man erkennt, daß für $\ell=\infty$ genau dann $F(\epsilon_d(\infty),\infty)=0$ gilt, wenn $J(\epsilon,\infty)=0$ gilt. Dann gilt aber $F(\epsilon_d(\infty),\ell)=0$ für alle ℓ, insbesondere auch für $\ell=0$. Das liefert gerade die obige Selbstkonsistenzbedingung

$$\epsilon_d(\infty)=\epsilon_d(0)+\int d\epsilon\frac{J(\epsilon,0)}{\epsilon_d(\infty)-\epsilon}. \tag{3.75}$$

3.2.3 Beispiel

$$J(\epsilon,0)=\frac{2V^2}{\pi D^2}\sqrt{D^2-\epsilon^2} \tag{3.76}$$

$2D$ ist die Bandbreite und $V=\sqrt{\sum_k V_k^2}$. Sei $\Gamma=\frac{2V^2}{D}$.

$$\epsilon_d(\infty)-\epsilon_d(0)+\frac{\Gamma}{D}\left(\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty))^2-D^2}-\epsilon_d(\infty)\right)=0 \tag{3.77}$$

falls $|\epsilon_d(\infty)|>D$.

$$\epsilon_d(\infty)-\epsilon_d(0)-\frac{\Gamma}{D}\epsilon_d(\infty)=0. \tag{3.78}$$

falls $|\epsilon_d(\infty)|<D$. Die Lösung ist

$$\epsilon_d(\infty)=\frac{\epsilon_d(0)}{1-\frac{\Gamma}{D}}. \tag{3.79}$$

$\epsilon_d(\infty)$ liegt innerhalb des Bandes falls $\Gamma<D-|\epsilon_d(0)|$.

Für hinreichend große V ($\Gamma>D$) liefert die Selbstkonsistenzbedingung zwei Lösungen für $\epsilon_d(\infty)$. Die Flußgleichungen liefern immer nur eine Lösung. Die zweite Lösung hat aber auch eine physikalische Bedeutung. Bei starker Hybridisierung bildet sich ein lokalisierter Zustand im Band, dessen Energie aus dem Band wandert. Das ist die zweite Lösung. Sie kann mit den Flußgleichungen in der derzeitigen Formulierung nicht gefunden werden.

3.2.4 Asymptotik

Oft ist der Fall interessant, in dem die Störstelle im Band liegt. Dann erhält man keine exponentielle Konvergenz von $J(\epsilon,\ell)$ gegen 0 mehr. Geht $J(\epsilon,\ell)$ überhaupt gegen 0? Wenn man zunächst annimmt, daß $J(\epsilon,\ell)$ fällt, dann kann man für große ℓ evt. den zweiten Term in der Flußgleichung für $J(\epsilon,\ell)$ vernachlässigen, da er quadratisch in der kleinen Größe $J(\epsilon,\ell)$ ist. Damit hat man für große ℓ die genäherte Gleichung

$$\frac{\partial J(\epsilon,\ell)}{\partial \ell}=-2(\epsilon-\epsilon_d)^2J(\epsilon,\ell) \tag{3.80}$$

mit der Lösung

$$J(\epsilon,\ell) = J(\epsilon,\ell_0)\exp(-2\int_{\ell_0}^{\ell} d\ell'(\epsilon-\epsilon_d)^2) \tag{3.81}$$

Die Flußgleichung für ϵ_d lautet dann

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = 2\int d\epsilon(\epsilon_d-\epsilon)J(\epsilon,\ell_0)\exp(-2\int_{\ell_0}^{\ell} d\ell'(\epsilon-\epsilon_d)^2) \tag{3.82}$$

Sei $\bar{\epsilon_d} = \frac{1}{\ell-\ell_0}\int_{\ell_0}^{\ell} d\ell'\epsilon_d$. Dann gilt

$$\begin{aligned}\frac{d\epsilon_d}{d\ell} &= 2\exp(-2\int_{\ell_0}^{\ell} d\ell'\epsilon_d^2 + 2\bar{\epsilon_d}^2(\ell-\ell_0)) \\ &\quad \int d\epsilon(\epsilon_d-\epsilon-\bar{\epsilon_d})J(\bar{\epsilon_d}+\epsilon,\ell_0)\exp(-2\epsilon^2(\ell-\ell_0))\end{aligned} \tag{3.83}$$

Macht man einen Ansatz

$$\epsilon_d = \epsilon_d(\infty) + a\ell^b \tag{3.84}$$

so gilt

$$\int_{\ell_0}^{\ell} d\ell'\epsilon_d^2 - \bar{\epsilon_d}^2(\ell-\ell_0) \propto \ell^{2b+1} \text{ oder für } b=-\frac{1}{2} \quad \propto \ln\ell \tag{3.85}$$

und

$$\epsilon_d - \bar{\epsilon_d} \propto \ell^b \tag{3.86}$$

$J(\bar{\epsilon_d}+\epsilon,\ell_0)$ ist näherungsweise konstant für große ℓ. Die rechte Seite der Flußgleichung für ϵ_d zerfällt exponentiell für $b > -\frac{1}{2}$ was im Widerspruch zur Annahme steht. Für $b < -\frac{1}{2}$ geht die Exponentialfunktion gegen 1. Damit geht die rechte Seite proportional zu $\ell^{b-\frac{1}{2}}$, was auch im Widerspruch zur Annahme steht. Für $b = -\frac{1}{2}$ erhält man auf der rechten Seite einen algebraischen Zerfall, der noch von a abhängt, nämlich $\propto \ell^{b-\frac{1}{2}-2a^2}$. Für $a = \pm\frac{1}{2}$ erhält man $\propto \ell^{-\frac{3}{2}}$ im Einklang mit der Annahme. Damit gilt also

$$\epsilon_d = \epsilon_d(\infty) \pm \frac{1}{2\ell^{-\frac{1}{2}}} \tag{3.87}$$

Eine genauere Analyse der Gleichungen zeigt, daß man ein Verhalten

$$\epsilon_d = \epsilon_d(\infty) \pm \frac{1}{2\ell^{-\frac{1}{2}}}g(\ln\ell) \tag{3.88}$$

bekommen kann, wobei $g(x)$ eine periodische Funktion ist, für die $g(x)^2$ im Mittel 1 ist. Das wurde in der Diplomarbeit von Peter Lenz gezeigt, siehe auch [14].

Mit diesem Resultat erhält man für $J(\epsilon_d(\infty),\ell)$ einen asypmtotischen Zerfall $\propto \ell^{-\frac{1}{2}}$. Das gilt auch dann noch, wenn man nicht, wie zu Beginn dieses Abschnitts, den zweiten Term in der Flußgleichung für $J(\epsilon_d(\infty),\ell)$ vernachlässigt. Für hinreichend große ℓ und für ϵ nahe bei $\epsilon_d(\infty)$ findet man also

$$J(\epsilon,\ell) \propto \ell^{-\frac{1}{2}}\exp(-2(\epsilon-\epsilon_d(\infty))^2\ell) \tag{3.89}$$

Die Asymptotik ist in diesem Fall ganz anders als im Fall von Matrizen oder allgemeiner im Fall von diskreten Spektren. Die Asymptotik der Flußgleichungen erlaubt also evt. eine Charakterisierung der Entartungen in Spektren von Hamiltonoperatoren.

3.2.5 Dynamik

Wenn ein diskreter Eigenwert in ein Kontinuum eingebettet ist, erwartet man, daß der entsprechende Zustand instabil wird und zerfällt. Dem transformierten Hamiltonoperator $H(\ell = \infty)$ sieht man das nicht an, da er keine Kopplung zwischen der Störstelle und dem Band enthält. Um zu verstehen, wie der Zerfall des Zustands mit dem Flußgleichungsverfahren berechnet werden kann, muß man die Korrelationsfunktion

$$C(t) = \langle d^\dagger(t)d(0) + d(t)d^\dagger(0)\rangle \tag{3.90}$$

berechnen. Diese Rechnung kann in dem hier diskutierten einfachen Modell exakt durchgeführt werden. Es ist interessant zu sehen, wie die Dissipation in dem Flußgleichungsverfahren beschrieben wird. Die wesentlichen Elemente dieser Rechnung finden sich in etwas veränderter Form in entsprechenden Rechnungen in anderen, interessanteren Modellen wieder.

Die Korrelationsfunktion $C(t)$ kann im Prinzip für jedes ℓ berechnet werden. Sie darf nicht von ℓ abhängen. Es ist bequem, sie für $\ell = \infty$ zu berechnen, da dann der Hamiltonoperator eine einfache Form hat und die Dynamik trivial wird. Da wir den Hamiltonoperator aber unitär transformiert haben, müssen wir die anderen Operatoren entsprechend transformieren. Um $C(t)$ zu berechnen, muß man $d^\dagger$ bei $\ell = \infty$ kennen. Die Flußgleichung für $d^\dagger(\ell)$ ist

$$\frac{d\,d^\dagger(\ell)}{d\ell} = [\eta, d^\dagger(\ell)] \tag{3.91}$$

Mit dem Ansatz

$$d^\dagger(\ell) = h(\ell)d^\dagger + \sum_k \lambda_k(\ell)c_k^\dagger \tag{3.92}$$

erhält man

$$[\eta, d^\dagger(\ell)] = h(\ell)\sum_k \eta_k c_k^\dagger - \sum_k \eta_k\lambda_k(\ell)d^\dagger + 2\sum_{k,q}\eta_{k,q}\lambda_q c_k^\dagger \tag{3.93}$$

und damit die Flußgleichungen

$$\frac{dh}{d\ell} = -\sum_k \eta_k\lambda_k \tag{3.94}$$

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = h(\ell)\eta_k + 2\sum_{k,q}\eta_{k,q}\lambda_q. \tag{3.95}$$

Diese Gleichungen müssen gelöst werden. Zunächst stellt man fest, daß die Summenregel

$$h^2 + \sum_k \lambda_k^2 = 1 \tag{3.96}$$

gilt, was bedeutet, daß $[d(\ell), d^\dagger(\ell)] = 1$. Setzt man η_k und $\eta_{k,q}$ in die Flußgleichungen ein, so erhält man

$$\frac{dh}{d\ell} = -\sum_k V_k(\epsilon_k - \epsilon_d)\lambda_k \tag{3.97}$$

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = h(\ell)V_k(\epsilon_k - \epsilon_d) + \sum_{k,q} V_kV_q\frac{\epsilon_k + \epsilon_q - 2\epsilon_d}{\epsilon_k - \epsilon_q}\lambda_q. \tag{3.98}$$

Für $\epsilon_k = \epsilon_d(\infty)$ gilt $(\epsilon_k - \epsilon_d) \propto \ell^{-\frac{1}{2}}$ und $V_k \propto \ell^{-\frac{1}{4}}$ falls $\epsilon_d(\infty)$ im Band liegt. Damit für diesen Wert von k λ_k nicht divergiert muß $h \to 0$ für $\ell \to \infty$ gelten. Dieses Resultat wird in der Lösung später auch deutlich. Damit findet man

$$C(t) = \sum_k \lambda_k(\infty)^2 (n_k \exp(i\epsilon_k t) + (1 - n_k) \exp(-i\epsilon_k t)) \tag{3.99}$$

$C(t)$ kann aus der Spektralfunktion

$$S(\omega) = \sum_k \lambda_k(\infty)^2 \delta(\omega - \epsilon_k) \tag{3.100}$$

berechnet werden. Die Summenregel $\sum_k \lambda_k(\infty)^2 = 1$ bedeutet $C(0) = 1$ oder $\int d\omega S(\omega) = 1$. $S(\omega)$ kann aus der Funktion

$$S_2(z, \ell) = \sum_k \frac{\lambda_k^2}{z - \epsilon_k} \tag{3.101}$$

durch

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi} \Im S_2(\omega - i0^+, \infty) \tag{3.102}$$

berechnet werden. Analog zu S_2 benötige ich die Funktionen

$$S_1(z, \ell) = \sum_k \frac{\lambda_k V_k}{z - \epsilon_k} \tag{3.103}$$

$$S_0(z, \ell) = \sum_k \frac{V_k^2}{z - \epsilon_k} \tag{3.104}$$

Die Funktion $S_0(z, \ell)$ ist uns schon bei der Lösung der Flußgleichungen für den Hamiltonoperator begegnet: Wir haben $\epsilon_d(\infty)$ als Lösung der Gleichung

$$\epsilon_d(\infty) = \epsilon_d(0) - \Re S_0(\epsilon_d(\infty), 0) \tag{3.105}$$

erhalten. Ich berechne jetzt die Ableitungen der Funktion S_2, S_1 und S_0 nach ℓ.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_2}{\partial \ell} &= 2 \sum_k \frac{\lambda_k \frac{d\lambda_k}{d\ell}}{z - \epsilon_k} \\
&= 2h \sum_k \frac{\lambda_k V_k (\epsilon_k - \epsilon_d)}{z - \epsilon_k} \\
&\quad + 2 \sum_{k,q} \frac{\lambda_k V_k \lambda_q V_q (\epsilon_k + \epsilon_q - 2\epsilon_d)}{(z - \epsilon_k)(\epsilon_k - \epsilon_q)} \\
&= 2h \sum_k \frac{\lambda_k V_k (\epsilon_k - \epsilon_d)}{z - \epsilon_k} \\
&\quad + \sum_{k,q} \frac{\lambda_k V_k \lambda_q V_q (\epsilon_k + \epsilon_q - 2\epsilon_d)}{\epsilon_k - \epsilon_q} \left(\frac{1}{z - \epsilon_k} - \frac{1}{z - \epsilon_q} \right) \\
&= 2h \sum_k \frac{\lambda_k V_k (\epsilon_k - \epsilon_d)}{z - \epsilon_k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\quad +2\sum_{k,q}\frac{\lambda_k V_k \lambda_q V_q(\epsilon_q-\epsilon_d)}{(z-\epsilon_k)(z-\epsilon_q)} \\
&= 2(h+S_1)\sum_k \frac{\lambda_k V_k(\epsilon_k-\epsilon_d)}{z-\epsilon_k} \qquad (3.106)
\end{aligned}$$

Ebenso findet man

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_1}{\partial \ell} &= \sum_k \frac{(\lambda_k \frac{dV_k}{d\ell}+V_k\frac{d\lambda_k}{d\ell})}{z-\epsilon_k} \\
&= h\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)}{z-\epsilon_k} \\
&\quad +\sum_{k,q}\frac{V_k^2\lambda_q V_q(\epsilon_k+\epsilon_q-2\epsilon_d)}{(z-\epsilon_k)(\epsilon_k-\epsilon_q)} \\
&\quad -\sum_k \frac{\lambda_k V_k(\epsilon_k-\epsilon_d)^2}{z-\epsilon_k} \\
&\quad +\sum_{k,q}\frac{\lambda_k V_k V_q^2(\epsilon_k+\epsilon_q-2\epsilon_d)}{(z-\epsilon_k)(\epsilon_k-\epsilon_q)} \\
&= (h+S_1)\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)}{z-\epsilon_k} \\
&\quad +(\epsilon_d-z+S_0)\sum_k \frac{\lambda_k V_k(\epsilon_k-\epsilon_d)}{z-\epsilon_k}-\frac{dh}{d\ell} \qquad (3.107)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_0}{\partial \ell} &= -2\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)2}{z-\epsilon_k} \\
&\quad +2\sum_{k,q}\frac{V_k^2 V_q^2(\epsilon_k+\epsilon_q-2\epsilon_d)}{(z-\epsilon_k)(\epsilon_k-\epsilon_q)} \\
&= 2(S_0-z+\epsilon_d)\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)}{z-\epsilon_k}-\frac{d\epsilon_d}{d\ell} \qquad (3.108)
\end{aligned}$$

Zusammengefasst hat man also

$$\frac{\partial(z-\epsilon_d-S_0)}{\partial \ell}=2(z-\epsilon_d-S_0)\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)2}{z-\epsilon_k} \qquad (3.109)$$

$$\frac{\partial(h+S_1)}{\partial \ell}=(h+S_1)\sum_k \frac{V_k^2(\epsilon_k-\epsilon_d)2}{z-\epsilon_k}-(z-\epsilon_d-S_0)\sum_k \frac{\lambda_k V_k(\epsilon_k-\epsilon_d)2}{z-\epsilon_k} \qquad (3.110)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial \ell}=2(h+S_1)\sum_k \frac{\lambda_k V_k(\epsilon_k-\epsilon_d)2}{z-\epsilon_k} \qquad (3.111)$$

und damit

$$S_2+\frac{(h+S_1)^2}{(z-\epsilon_d-S_0)}=\text{konstant} \qquad (3.112)$$

Wertet man diese Konstante bei $\ell = \infty$ und bei $\ell = 0$ aus, so findet man

$$S_2(z,\infty) + \frac{h(\infty)^2}{z - \epsilon_d(\infty)} = \frac{-1}{z - \epsilon_d(0) - S_0(z,0)} \tag{3.113}$$

Da die rechte Seite in dem Fall, wo $\epsilon_d(\infty)$ im Band liegt, keinen Pol bei $z = \epsilon_d(\infty)$ hat, folgt, wie schon aus dem asymptotischen Verhalten indirekt geschlossen, daß $h(\infty) = 0$. Mit

$$\Im S_0(\omega - i0^+, 0) = \pi J(\omega, 0) \tag{3.114}$$

findet man

$$\Im S_2(\omega - i0^+, 0) = \frac{\pi J(\omega,0)}{(\omega - \epsilon_d(0) - \Re S_0(\omega,0))^2 + \pi^2 J(\omega,0)^2} \tag{3.115}$$

oder für die Spektralfunktion

$$S(\omega) = \frac{J(\omega,0)}{(\omega - \epsilon_d(0) - \Re S_0(\omega,0))^2 + \pi^2 J(\omega,0)^2} \tag{3.116}$$

Der erste Term im Nenner von $S(\omega)$ hat eine Nullstelle bei $\omega = \epsilon_d(\infty)$. Der zweite Term liefert die Dämpfung. $S(\omega)$ wird also ein Maximum bei einem Wert von ω haben, der von $\epsilon_d(\infty)$ etwas verschoben ist.

Die Fouriertransformierte $\tilde{C}(\omega)$ von $C(t)$ ist durch

$$\tilde{C}(\omega) = S(\omega)n(\omega) + (1 - n(-\omega))S(-\omega) \tag{3.117}$$

gegeben, wobei $n(\omega)$ die Fermifunktion ist. Bei $T = 0$ und $\epsilon_F = 0$ erhält man

$$\tilde{C}(\omega) = \theta(\omega)(S(\omega) + S(-\omega)) \tag{3.118}$$

Das Verhalten von $C(t)$ für lange Zeiten t hängt also von dem Verhalten von $J(\omega)$ an der Fermikante ab. Gilt $J(\omega) \propto |\omega|^s$, $s > -1$ für kleine ω, so findet man entsprechend $S(\omega) \propto |\omega|^s$ und damit $\tilde{C}(\omega) \propto |\omega|^s$. Das liefert $C(t) \propto t^{-s-1}$ für große t.

3.2.6 Beispiel

Ich betrachte noch einmal das Beipiel

$$J(\epsilon, 0) = \frac{\Gamma}{\pi D}\sqrt{D^2 - \epsilon^2} \tag{3.119}$$

Für $|\omega| < D$ gilt

$$\Re S_0(\omega, 0) = \int d\epsilon \frac{J(\epsilon,0)}{\omega - \epsilon} = \frac{\Gamma}{D}\omega \tag{3.120}$$

Damit gilt

$$S(\omega) = \frac{\frac{\Gamma}{\pi D}\sqrt{D^2 - \omega^2}}{(\omega - \epsilon_d(0) - \frac{\Gamma}{D}\omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{D^2}(D^2 - \omega^2)} \tag{3.121}$$

Im Limes $D \to \infty$ erhält man

$$S(\omega) = \frac{\Gamma/\pi}{(\omega - \epsilon_d(0))^2 + \Gamma^2} \tag{3.122}$$

also einen exponentiellen Zerfall für die Korrelationsfunktion $C(t)$. Allerdings erhält man in diesem Limes auch keine Änderung von ϵ_d, es gilt $\epsilon_d(\infty) = \epsilon_d(0)$. Für endliche Werte von D erhält man einen algebraischen Zerfall, insbesondere dann, wenn Γ von der selben Größenordnung wie D ist. Dieses Verhalten ist typisch und gilt entsprechend auch für andere Funktionen $J(\epsilon, 0)$. Eine Besonderheit entsteht, wenn die Fermienergie an einer Bandkante liegt oder allgemeiner, wenn $J(\epsilon, 0)$ an der Fermienergie entweder divergiert oder mit einem Potenzgesetz verschwindet. Dann sieht das Langzeitverhalten ganz anders aus, siehe die Diskussion oben.

3.3 Flußgleichungen für das Spin-Boson Modell

3.3.1 Flußgleichungen für dissipative Quantensysteme

Allgemeiner Hamiltonoperator

$$H = H_S + A \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger) + \sum_k \omega_k : b_k^\dagger b_k : \, . \tag{3.123}$$

$$J(\omega) = \sum_k \lambda_k^2 \delta(\omega - \omega_k) \tag{3.124}$$

Normalordnung: $: b_k^\dagger b_k := b_k^\dagger b_k - n_k$. Wichtig für $T > 0$. Hier nur $T = 0$. Typischerweise ist H_S der Hamiltonoperator eines Teilchens in einem Potential, A die Koordinate des Teilchens. Die Kopplung wäre allgemein $\sum_k W_k(q - q_k)$. Entwickelt man die Funktionen W_k um ein Minimum, so erhält man als ersten nicht trivialen Anteil $\sum_k \frac{c_k}{2}(q - q_k)^2$. Ausmultipliziert erhält man einen Anteil $\propto q^2$, der in H_S enthalten ist, einen Anteil $\propto q_k^2$, der im thermodynamischen Limes wegen $c_k \propto \lambda_k \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ keine Rolle spielt, und einen Anteil, der gerade die Kopplung in H beschreibt. Beispiele:

- Das Spin–Boson–Modell

$$H_S = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x + E_0 \, , \quad A = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{3.125}$$

- Der dissipative harmonische Oszillator

$$H_S = \omega b^\dagger b + E_0 \, , \quad A = (b + b^\dagger) \tag{3.126}$$

  In diesem Fall ist der Hamiltonoperator quadratisch, ähnlich wie im Fall einer Störstelle in einem Band, und exakt lösbar. Die Lösung der Flußgleichungen ist analog zu diesem Fall möglich.

Wahl von η

$$\eta = i \sum_k A_k (b_k + b_k^\dagger) + \sum_k B_k (b_k - b_k^\dagger) \tag{3.127}$$

$$\begin{aligned}
[\eta, H] &= i \sum_k \omega_k A_k (b_k - b_k^\dagger) + \sum_k \omega_k B_k (b_k + b_k^\dagger) \\
&\quad + i \sum_k [A_k, H_S](b_k + b_k^\dagger) + \sum_k [B_k, H_S](b_k - b_k^\dagger) \\
&\quad + i \sum_{k,q} \lambda_q [A_k, A] : (b_k + b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : + i \sum_k \lambda_k [A_k, A](2n_k + 1) \\
&\quad + \sum_{k,q} \lambda_q [B_k, A] : (b_k - b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : + \sum_k \lambda_k [B_k, A]_+
\end{aligned} \tag{3.128}$$

Bedingungen

$$A_k = \frac{i}{\omega_k}[B_k, H_S], \tag{3.129}$$

$$\omega_k B_k + i[A_k, H_S] = -\lambda_k A f(\omega_k, \ell). \tag{3.130}$$

In den einfachen Fällen, dissipativer harmonischer Oszillator und Spin–Boson–Modell können diese Bedingungen gelöst werden. Auf diese Weise können die Terme in $[\eta, H]$ eliminiert werden, die Ausdrücke der Form $(b_k - b_k^\dagger)$ enthalten. Es bleiben normalgeordnete Terme, die quadratisch in den Bosonen sind. Im Fall des harmonischen Oszillators kann man einen zusätzlichen Term

$$\sum_{k,q} \eta_{k,q} : (b_k + b_k^\dagger)(b_q - b_q^\dagger) : \tag{3.131}$$

in η mitnehmen, der diese Terme eliminiert. Da H in diesem Fall quadratisch ist, werden keine neuen Terme erzeugt. Das Problem kann ähnlich wie für eine Störstelle im Band gelöst werden.

Flußgleichungen:

$$\frac{d\lambda_k}{d\ell} = -\lambda_k f(\omega_k, \ell) \tag{3.132}$$

$$\frac{dH_S}{d\ell} = i \sum_k \lambda_k [A_k, A](2n_k + 1) + \sum_k \lambda_k [B_k, A]_+. \tag{3.133}$$

3.3.2 Spin–Boson–Modell

$$A_k = -\frac{1}{2} \lambda_k f(\omega_k, \ell) \frac{\Delta}{\omega_k^2 - \Delta^2} \sigma_y, \tag{3.134}$$

$$B_k = -\frac{1}{2} \lambda_k f(\omega_k, \ell) \frac{\omega_k}{\omega_k^2 - \Delta^2} \sigma_z. \tag{3.135}$$

$f(\omega, \ell)$ kann noch frei gewählt werden. Damit erhält man die Flußgleichungen

$$\frac{\partial J(\omega, \ell)}{\partial \ell} = -2 f(\omega, \ell) J(\omega, \ell) \tag{3.136}$$

$$\frac{dH_S}{d\ell} = \frac{1}{2} \int d\omega J(\omega, \ell) f(\omega, \ell) \left(\frac{\Delta}{\omega^2 - \Delta^2} \sigma_x - \frac{\omega}{\omega^2 - \Delta^2} \right). \tag{3.137}$$

Wähle $f(\omega, \ell) = (\omega - \Delta)^2$. Diese Wahl ist ganz analog zur früheren Wahl von η. Flußgleichungen für Δ und E_0:

$$\frac{d\Delta}{d\ell} = -\Delta \int d\omega J(\omega, \ell) \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta}, \tag{3.138}$$

$$\frac{dE_0}{d\ell} = -\frac{1}{2} \int d\omega \omega J(\omega, \ell) \frac{\omega - \Delta}{\omega + \Delta}. \tag{3.139}$$

Die Struktur dieser Gleichungen ist ähnlich wie im vorher diskutierten Modell der Störstelle im Band. Dort trat lediglich in der Gleichung für $J(\omega, \ell)$ ein quadratischer Term auf. Ein entsprechender Term würde in den Gleichungen für das Spin–Boson Problem auftreten, wenn man in η in ähnlicher weise höhere Terme mitnimmt. Für das Spin–Boson Problem sind die Gleichungen aber auch dann nur näherungsweise gültig, denn es werden durch diesen Term weitere höhere Terme im Hamiltonoperator erzeugt, die vernachlässigt werden müssen. Wir kommen später auf diesen Punkt zurück.

3.3.3 Näherungslösung und Beispiele

Die Gleichung für $J(\omega,\ell)$ wird durch

$$J(\omega,\ell) = J(\omega,0)\exp(-2\int_0^\ell d\ell'(\omega-\Delta)^2) \tag{3.140}$$

gelöst. Eingesetzt in die Gleichung für Δ erhält man

$$\frac{d\ln\Delta}{d\ell} = \frac{1}{2}\int d\omega \frac{\partial J(\omega,\ell)}{\partial \ell}\frac{1}{\omega^2-\Delta^2} \tag{3.141}$$

Ich ersetzte auf der rechten Seite Δ durch $\Delta(\infty)$. Das liefert

$$\frac{d\ln\Delta}{d\ell} = \frac{1}{2}\frac{d}{d\ell}\int d\omega J(\omega,\ell)\frac{1}{\omega^2-\Delta^2(\infty)}, \tag{3.142}$$

und damit

$$\ln\frac{\Delta(\infty)}{\Delta} = -\frac{1}{2}\int d\omega \frac{J(\omega,\ell)}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} \tag{3.143}$$

Beispiele:

- Das ohmsche Bad:

  $$J(\omega,0) = 2\alpha\omega f_c(\omega/\omega_c)$$

  $$\int d\omega \frac{J(\omega,\ell)}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} \approx 2\alpha\int_0^{\omega_c} d\omega\frac{\omega}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} \approx 2\alpha\ln\frac{\Delta(\infty)}{\omega_c}$$

  Das liefert

  $$\frac{\Delta(\infty)}{\Delta(0)} \propto \left(\frac{\Delta(0)}{\omega_c}\right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}$$

  für $\alpha < 1$, $\Delta(\infty) = 0$ für $\alpha > 1$. Es gibt also einen Übergang von einem delokalisierten Verhalten ($\Delta(\infty) > 0$) für kleine α zu Lokalisierung ($\Delta(\infty) = 0$) für große α.

- Das subohmsche Bad:

  $$J(\omega,0) = K^{1-s}\omega^s f_c(\omega/\omega_c)$$

  mit $s < 1$.

  $$\int d\omega \frac{J(\omega,\ell)}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} \approx K^{1-s}\int_0^{\omega_c} d\omega\frac{\omega^s}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} = \frac{\pi}{2}\left(\frac{\Delta_\infty}{K}\right)^{s-1}\cot(\frac{\pi}{2}(1-s))$$

  Die letzte Gleichung gilt im Limes $\omega_c \to \infty$. Man erhält damit

  $$\Delta_0 = \Delta_\infty \exp\left(\frac{\pi}{4}\left(\frac{\Delta_\infty}{K}\right)^{s-1}\cot(\frac{\pi}{2}(1-s))\right)$$

  Unter der Bedingung

  $$\Delta_0 > \Delta_c \stackrel{\text{def}}{=} K\left(\frac{4\tan(\frac{\pi}{2}(1-s))}{e\,\pi(1-s)}\right)^{\frac{1}{s-1}}$$

gilt

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

Sonst ist $\Delta_\infty = 0$. Auch hier beobachtet man einen Übergang von einem delokalisierten Verhalten zu Lokalisierung. Im Gegensatz zum ohmschen Fall ist Δ_∞ am Übergang unstetig.

- Das superohmsche Bad

$$J(\omega,0) = K^{1-s}\omega^s f_c(\omega/\omega_c)$$

$$\int d\omega \frac{J(\omega,\ell)}{\omega^2-\Delta^2(\infty)} \approx \frac{1}{s-1}\frac{\omega_c^{s-1}}{K^{s-1}}$$

$$\Delta_\infty = \Delta_0 \exp\left(-\frac{1}{2(s-1)}\frac{\omega_c^{s-1}}{K^{s-1}}\right).$$

In diesem Fall ist Δ_∞ immer positiv.

Ich betrachte jetzt den Fall

$$\frac{1}{\sqrt{\ell}} \gg \Delta. \tag{3.144}$$

Dann sind die typischen ω–Werte, die zu den Integralen beitragen, groß verglichen mit Δ und man erhält in guter Näherung

$$J(\omega,\ell) = J(\omega,0)\exp(-2\omega^2\ell) \tag{3.145}$$

$$\Delta = \Delta(0)\exp\left(-\frac{1}{2}\int d\omega \frac{J(\omega,0)}{\omega^2}(1-\exp(-2\omega^2\ell))\right) \tag{3.146}$$

Das alte Resultat aus der Renormierungsrechnung zu Beginn der Vorlesung läßt sich in der Form

$$\Delta(\omega_0) = \Delta(\omega_c)\exp\left(-\frac{1}{2}\int d\omega \frac{J(\omega,0)}{\omega^2}(1-\theta(\omega_0-\omega))\right) \tag{3.147}$$

schreiben. Man kann also den Parameter $\frac{1}{\sqrt{\ell}}$ als Abschneideparameter interpretieren. Der Unterschied besteht nur in der Abschneidefunktion, die einmal eine Gaussfunktion, das andere Mal eine θ–Funktion ist.

Der wesentliche Unterschied zwischen der Flußgleichung aus der kontinuierlichen unitären Transformation und der Flußgleichung aus der Renormierung besteht aber darin, daß man bei der kontinuierlichen unitären Transformation den Limes $\ell \to \infty$ durchführen kann, während man in der Renormierung nicht den entsprechenden Limes $\omega_0 \to 0$ durchführen kann. Dies ist möglich, weil man nicht hohe Moden ausintegriert, sondern weil man Moden mit Energien, die relativ zu Δ weiter entfernt liegen, schneller abkoppelt, als solche, deren Energien nahe bei Δ liegen. In der Flußgleichung für Δ erkennt man, daß Moden mit Energien oberhalb von Δ dazu führen, daß Δ kleiner wird, während Moden mit Energien unterhalb von Δ dazu führen, daß Δ größer wird. Für $\ell \gtrapprox \Delta^{-2}$ verschiebt sich Δ nur noch wenig, da $J(\omega,\ell)$ dann schon relativ symmetrisch um Δ liegt.

Abbildungen:

Bild 1: $J(\omega,\ell)$ für verschiedene $l = \ell/\Delta^{-2}$, $J(\omega,0) \propto \omega$. Man erkennt, wie das Maximum von $J(\omega,\ell)$ sich nach rechts verschiebt und langsam abnimmt.

Bild 2: Δ als Funktion von ℓ für $J(\omega,0) = 2\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$.

Bild 3: $\Delta(\infty)$ als Resultat der Flußgleichungen verglichen mit der Näherungslösung, wieder für $J(\omega,0) = 2\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$.

3.3.4 Asymptotisches Verhalten

Die Flußgleichung für Δ lautet

$$\begin{aligned}
\frac{d\Delta}{d\ell} &= -\Delta \int d\omega J(\omega,0) \exp(-2\int_0^\ell d\ell'(\omega-\Delta)^2)\frac{\omega-\Delta}{\omega+\Delta} \\
&= -\Delta \exp(-2\int_0^\ell d\ell'\Delta^2 + 2\bar{\Delta}^2\ell) \int d\omega J(\omega,0)\exp(-2(\omega-\bar{\Delta})^2\ell)\frac{\omega-\Delta}{\omega+\Delta} \\
&= -\Delta \exp(-2\int_0^\ell d\ell'\Delta^2 + 2\bar{\Delta}^2\ell) \int d\omega J(\omega+\bar{\Delta})\exp(-2\omega^2\ell)\frac{\omega+\bar{\Delta}-\Delta}{\omega+\bar{\Delta}+\Delta} \\
&\simeq -\Delta \exp(-2\int_0^\ell d\ell'\Delta^2 + 2\bar{\Delta}^2\ell) J(\bar{\Delta})\sqrt{\frac{\pi}{2\ell}}\frac{\bar{\Delta}-\Delta}{\bar{\Delta}+\Delta}
\end{aligned} \tag{3.148}$$

Dieser Ausdruck kann wie im Fall einer Störstelle im Band analysiert werden. Falls $\Delta(\infty) > 0$ erhält man als asymptotisches Verhalten

$$\Delta - \Delta(\infty) = \pm\frac{1}{2\sqrt{\ell}}g(\ln\ell) \tag{3.149}$$

mit einer periodischen Funktion $g(x)$, für die $g(x)^2$ im Mittel 1 ist [14]. Approximativ genügt $\Delta - \Delta(\infty) = \pm\frac{1}{2\sqrt{\ell}}$. Damit erhält man $J(\Delta(\infty),\ell) \propto \frac{1}{\sqrt{\ell}}$. Für andere Werte von ω fällt $J(\omega,\ell)$ exponentiell ab.

3.3.5 Korrelationsfunktionen, Erster Teil

Bemerkung vorweg: Im folgenden werden wir immer Gleichgewichtskorrelationsfunktionen betrachten. In manchen Fällen sind auch Korrelationsfunktionen interessant, die man erhält, wenn man sich das System aus einem gegebenem Anfangszustand entwickeln läßt. Dies soll hier nicht betrachtet werden. Da man in so einem Fall den präparierten Anfagszustand mittransformieren müßte, sind solche Korrelationsfunktionen mit dem Flußgleichungsverfahren kaum zugänglich.

Die wesentliche Korrelationsfunktion für das Spin–Boson Modell ist die Korrelationsfunktion

$$C(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\langle\sigma_z(t)\sigma_z(0) + \sigma_z(0)\sigma_z(t)\rangle_T \tag{3.150}$$

wobei $\langle.\rangle_T$ den thermischen Erwartungswert bei einer Temperatur T meint. Später werden wir nur den Limes $T \to 0$ betrachten. Da für $\ell \to \infty$ der Hamiltonoperator und damit die Zeitentwickulung einfach wird, ist es günstig, $C(t)$ in diesem Limes zu berechnen. Dazu müssen wir $\sigma_z(\ell)$ berechnen. Mit dem Ansatz

$$\sigma_z(\ell) = h(\ell)\sigma_z + \sigma_x\sum_k \chi_k(\ell)(b_k + b_k^\dagger)\ . \tag{3.151}$$

erhält man die Flußgleichungen

$$\frac{dh}{d\ell} = -\Delta\sum_k \lambda_k\chi_k(2n_k+1)\frac{\omega_k-\Delta}{\omega_k+\Delta} \tag{3.152}$$

$$\frac{d\chi_k}{d\ell} = \Delta h \lambda_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \tag{3.153}$$

Für die Korrelationsfunktion erhält man

$$C(t) = h^2(\infty)\cos(\Delta_\infty t) + \sum_k \chi_k^2(\infty)(2n_k + 1)\cos(\omega_k t). \tag{3.154}$$

$h^2 + \sum_k \chi_k^2$ ist konstant:

$$\frac{d}{d\ell}(h^2 + \sum_k \chi_k^2) = 0 \tag{3.155}$$

Das liefert automatisch $C(0) = 1$. Für kleine $\omega_k \ll \Delta_\infty$ wird χ_k proportional zu λ_k erzeugt. Die Fouriertransformierte von $C(t)$ ist deshalb für kleine Frequenzen proportional zu $J(\omega, 0)$. Das ist das richtige Langzeitverhalten. In allen exakten Resultaten (für spezielle $J(\omega, 0)$) für das Spin–Boson Modell erhält man dieses Verhalten. In der Flußgleichung für χ_k fällt für $\omega_k = \Delta_\infty$ der Faktor $\frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k - \Delta}$ auf der rechten Seite $\propto \ell^{-1/2}$ und $\lambda_k \propto \ell^{-1/4}$. Damit χ_k nicht divergiert, muß $h \to 0$ im Limes $\ell \to \infty$. Eine numerische Lösung dieser Gleichungen liefert aber nur $h \propto \ell^{-1/4}$, so daß χ_k immer noch logarithmisch divergiert. Das führt zu einer Divergenz in der Fouriertransformierten von $C(t)$. Die Korrelationsfunktion wird also nicht richtig wiedergegeben. Eine ähnliche Divergenz hätte man auch im Fall der Störstelle im Band erhalten, wenn man $\eta_{k,q}$ vernachlässigt hätte. Offenbar ist der quadratische Term in η wichtig.

3.3.6 Neue Wahl für η

Ich wähle jetzt

$$\eta = i\sum_k A_k(b_k + b_k^\dagger) + \sum_k B_k(b_k - b_k^\dagger) + \sum_{k,q} \eta_{k,q} : (b_k + b_k^\dagger)(b_q - b_q^\dagger) : \tag{3.156}$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned}
[\eta, H] \quad = \quad & i\sum_k \omega_k A_k(b_k - b_k^\dagger) + \sum_k \omega_k B_k(b_k + b_k^\dagger) \\
& + i\sum_k [A_k, H_S](b_k + b_k^\dagger) + \sum_k [B_k, H_S](b_k - b_k^\dagger) \\
& + i\sum_{k,q} \lambda_q \langle [A_k, A] \rangle : (b_k + b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : + i\sum_k \lambda_k [A_k, A](2n_k + 1) \\
& + i\sum_{k,q} \lambda_q ([A_k, A] - \langle [A_k, A] \rangle) : (b_k + b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : \\
& + \sum_{k,q} \lambda_q [B_k, A] : (b_k - b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : + \sum_k \lambda_k [B_k, A]_+ \\
& + \sum_{k,q} \eta_{k,q}\omega_k : (b_k - b_k^\dagger)(b_q - b_q^\dagger) : + \sum_{k,q} \eta_{k,q}\omega_q : (b_k + b_k^\dagger)(b_q + b_q^\dagger) : \\
& + 2\sum_{k,q} \eta_{k,q}\lambda_q (b_k + b_k^\dagger) A
\end{aligned} \tag{3.157}$$

Die Terme, die das System quadratisch an das Bad koppeln, werden vernachlässigt. Durch $\eta_{k,q}$ sind aber Kopplungen unter den Badmoden berücksichtigt. Im Fall des harmonischen Oszillators verschwinden die vernachlässigten Terme, die Gleichungen lassen sich dann lösen. $\eta_{k,q}$ wird so gewählt, daß die Kopplungen unter den Badmoden im Hamiltonoperator nicht explizit auftauchen,. Das liefert die Bedingungen

$$\eta_{k,q}\omega_k + \eta_{q,k}\omega_q = 0, \tag{3.158}$$

$$\eta_{k,q}\omega_q + \eta_{q,k}\omega_k + i\lambda_q\langle[A_k, A]\rangle + i\lambda_k\langle[A_q, A]\rangle = 0. \tag{3.159}$$

und damit für das Spin–Boson Modell bei $T = 0$

$$\eta_{k,q} = \frac{1}{2}\frac{\lambda_k\lambda_q\Delta\omega_q}{\omega_k^2 - \omega_q^2}\left(\frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \frac{\omega_q - \Delta}{\omega_q + \Delta}\right) \tag{3.160}$$

Man erhält dadurch eine neue Gleichung für $J(\omega, \ell)$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(\omega,\ell)}{\partial \ell} &= -2(\omega-\Delta)^2 J(\omega,\ell) \\ &\quad +2\Delta J(\omega,\ell)\int d\omega' \frac{\omega' J(\omega',\ell)}{\omega^2-\omega'^2}\left(\frac{\omega-\Delta}{\omega+\Delta}+\frac{\omega'-\Delta}{\omega'+\Delta}\right),\end{aligned} \tag{3.161}$$

Welchen Einfluß hat der zweite Term? Mit dem Ansatz

$$J(\omega, \ell) = K(\omega, \ell)\omega^s \exp(-2\int d\ell'(\omega - \Delta)^2) \tag{3.162}$$

erhält man

$$\frac{\partial K(\omega,\ell)}{\partial \ell} = 2\Delta K(\omega,\ell)\int d\omega' \frac{\omega'^{s+1}K(\omega',\ell)}{\omega^2-\omega'^2}\left(\frac{\omega'-\Delta}{\omega'+\Delta}+\frac{\omega-\Delta}{\omega+\Delta}\right)\exp(-2\int d\ell'(\omega'-\Delta)^2) \tag{3.163}$$

Für $\Delta \lessapprox \omega \ll \frac{1}{\sqrt{\ell}}$ ist die rechte Seite negativ und $K(\omega, \ell)$ nimmt ab. Für kleine $\omega \ll \Delta$ ist die Ableitung von $K(\omega, \ell)$ dagegen immer positiv. Das hat zur Folge, daß $K(\omega, \ell)$ für kleine ω wächst. Dadurch erhält man eine Asymmetrie in $J(\omega, \ell)$. Kleine Frequenzen werden relativ stärker gewichtet als große Frequenzen. Der Faktor $\exp(-2\int(\omega - \Delta)^2 d\ell')$ sorgt zwar weiter für eine Konvergenz von $J(\omega, \ell) \to 0$, aber in der Gleichung für Δ führt die stärkere Gewichtung der kleinen ω dazu, daß sich das Vorzeichen von der Ableitung von Δ umdrehen kann. In der numerischen Integration beobachtet man dieses Verhalten im subohmschen Fall ($s < 1$) und im ohmschen Fall ($s = 1$, $K(\omega, 0) = 2\alpha$) für hinreichend große α, $\alpha \gtrapprox 0.2$ Im superohmschen Fall und im ohmschen Fall für kleine α bleibt Δ eine monotone Funktion von ℓ. Ist Δ nicht mehr monoton, so kann dies zu weiteren Schwierigkeiten führen. Wir werden dies bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen sehen. Das Problem entsteht letztlich durch den Nenner $\omega^2 - \omega'^2$. Dieser Nenner führt dazu, daß außerdiagonale Matrixelemente, die zu kleinen Energiedifferenzen gehören, auch schon für kleine ℓ große Änderungen erfahren können. Das widerspricht unserer ursprünglichen Idee, zuerst die Matrixelemente zu eliminieren, die zu großen Energiedifferenzen gehören. Dieses Problem tritt offenbar für die niedrig liegenden Moden auf. Ist die Dichte der niedrig liegenden Moden klein, so entsteht das Problem nicht.

3.3.7 Korrelationsfunktionen, Zweiter Teil

Mit dem gleichen Ansatz

$$\sigma_z(\ell) = h(\ell)\sigma_z + \sigma_x \sum_k \chi_k(\ell)(b_k + b_k^\dagger)\ . \tag{3.164}$$

erhält man jetzt die Flußgleichungen

$$\frac{dh}{d\ell} = -\Delta \sum_k \lambda_k \chi_k (2n_k + 1) \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} \tag{3.165}$$

$$\frac{d\chi_k}{d\ell} = \Delta h \lambda_k \frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \sum_q \chi_q \frac{\lambda_k \lambda_q \Delta \omega_q}{\omega_k^2 - \omega_q^2} \tanh \frac{\beta\Delta}{2} \left(\frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \frac{\omega_q - \Delta}{\omega_q + \Delta} \right) \tag{3.166}$$

Als erste Konsequenz des zweiten Terms in der Gleichung für χ_k erhält man eine Verletzung der Summenregel $h^2 + \sum_k \chi_k^2 = 1$. Es gilt

$$\frac{d}{d\ell}(h^2 + \sum_k \chi_k^2) = 2\Delta \sum_{k,q} \frac{\chi_k \lambda_k \chi_q \lambda_q}{\omega_k + \omega_q} \left(\frac{\omega_k - \Delta}{\omega_k + \Delta} + \frac{\omega_q - \Delta}{\omega_q + \Delta} \right) \tag{3.167}$$

Aus dem asymptotischen Verhalten für λ_k ergibt sich, daß die rechte Seite für große ℓ proportional zu ℓ^{-2} ist. Die Größe $h^2 + \sum_k \chi_k^2$ ist asymptotisch konstant.

Um einen Ausdruck für die Fouriertransformierte von $C(t)$ zu bekommen, gehen wir so vor, wie im Fall der Störstelle im Band. Wir führen die Funktionen

$$S_2(z,\ell) = 2 \sum_k \frac{\omega_k \chi_k^2}{z - \omega_k^2}, \tag{3.168}$$

$$S_1(z,\ell) = \sum_k \frac{\omega_k \chi_k \lambda_k}{z - \omega_k^2}, \tag{3.169}$$

$$S_0(z,\ell) = \sum_k \frac{\omega_k \lambda_k^2}{z - \omega_k^2}. \tag{3.170}$$

ein. Aus diesen Funktionen werden wir versuchen, eine Erhaltungsgröße zu konstruieren. Da das Problem nicht exakt lösbar ist, können wir nicht erwarten, eine Erhaltungsgröße zu finden. Es ist aber möglich, eine Größe zu finden, die asymptotisch konstant ist. Die Ableitungen sind

$$\frac{\partial S_2}{\partial \ell} = 4\Delta(h + S_1) \sum_k \frac{\lambda_k \chi_k \omega_k (\omega_k - \Delta)}{(z - \omega_k^2)(\omega_k + \Delta)} \tag{3.171}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_1}{\partial \ell} &= (\Delta^2 + \Delta S_0 - z) \sum_k \frac{\lambda_k \chi_k \omega_k (\omega_k - \Delta)}{(z - \omega_k^2)(\omega_k + \Delta)} \\ &\quad + \Delta(h + S_1) \sum_k \frac{\lambda_k^2 \omega_k (\omega_k - \Delta)}{(z - \omega_k^2)(\omega_k + \Delta)} - \frac{dh}{d\ell} \\ &\quad + \sum_k \frac{\lambda_k \chi_k (\omega_k - \Delta)^2}{\omega_k + \Delta} \end{aligned} \tag{3.172}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_0}{\partial \ell} &= 2(\Delta^2 + \Delta S_0 - z) \sum_k \frac{\lambda_k^2 \omega_k (\omega_k - \Delta)}{(z - \omega_k^2)(\omega_k + \Delta)} - \frac{d\Delta}{d\ell} \\ &\quad + 2 \sum_k \frac{\lambda_k^2 (\omega_k - \Delta)^2}{\omega_k + \Delta} \end{aligned} \tag{3.173}$$

Damit gilt

$$\frac{\partial}{\partial\ell}\left(S_2 - \frac{2\Delta(h+S_1)^2}{\Delta^2 - z + \Delta S_0}\right) = -\frac{2(h+S_1)^2}{\Delta^2 - z + \Delta S_0}\frac{d\Delta}{d\ell} - \frac{4\Delta(h+S_1)}{\Delta^2 - z + \Delta S_0}\sum_k \frac{\lambda_k\chi_k(\omega_k-\Delta)^2}{\omega_k+\Delta} + \frac{2\Delta^2(h+S_1)^2}{(\Delta^2 - z + \Delta S_0)^2}\frac{d\Delta}{d\ell} + \frac{4\Delta^2(h+S_1)^2}{(\Delta^2 - z + \Delta S_0)^2}\sum_k \frac{\lambda_k^2(\omega_k-\Delta)^2}{\omega_k+\Delta} \tag{3.174}$$

Die ersten drei Terme sind proportional zu $\propto \ell^{-2}$ für große ℓ, der letzte Term verschwindet schneller. Die Größe

$$S_2 - \frac{2\Delta(h+S_1)^2}{\Delta^2 - z + \Delta S_0} \tag{3.175}$$

ist also asymptotisch kontant. Die Fouriertransformierte

$$\hat{C}(\omega) = \sum_k \chi_k^2(\infty)\delta(\omega - \omega_k) \tag{3.176}$$

der Korrelationsfunktion

$$C(t) = \int d\omega \hat{C}(\omega)\exp(i\omega t) \tag{3.177}$$

erhält man aus $S_2(z,\infty)$ mittels $\hat{C}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\Im S_2(\omega^2 - i0_+, \infty)$. Man kann $\Im S_2(\omega^2 - i0_+, \infty)$ numerisch bestimmen, indem man die Flußgleichungen bis zu einem hinreichend großen Wert von ℓ integriert und dann die asymptotischen Erhaltungsgrößen benutzt:

$$S_2(z,\infty) = S_2(z,\ell) - \frac{2\Delta(h(\ell) + S_1(z,\ell))^2}{\Delta^2(\ell) - z + \Delta(\ell)S_0(z,\ell)} \tag{3.178}$$

Betrachtet man die Flußgleichung für χ_k, so beobachtet man, daß der erste Term für kleine ω_k negativ, für große ω_k positiv ist. Entsprechend wird χ_k für kleine ω_k negativ und für große ω_k positiv. Für ein endliches ℓ hat daher χ_k als Funktion von ω_k eine Nullstelle. Entsprechend hat auch $\Im S_2(\omega^2 - i0_+, \ell)$ für einen Wert von ω eine Nullstelle. Diese Nullstelle liegt typischerweise in der Nähe von Δ. Diese Nullstelle wird durch den zweiten Term im Ausdruck für $S_2(z,\infty)$ aufgefüllt. Wenn Δ keine monotone Funktion von ℓ ist, ist aber das Maximum im Imaginärteil des zweiten Terms in $S_2(z,\infty)$ gegenüber dem Minimum in $\Im S_2(\omega^2 - i0_+, \ell)$ stark verschoben. In diesem Fall kann diese Methode nicht angewandt werden. Man kann auf diese Weise also nur Korrelationsfunktionen für superohmsche Bäder mit $J(\omega,0) \propto \omega^s$, $s > 1$ oder für das ohmsche Bad $J(\omega,0) = 2\alpha\omega$ für hinreichend kleine α zuverlässig berechnen.

Um die Korrelationsfunktionen zu berechnen, gehen wir so vor: Die Flußgleichungen für χ_k und h werden bis zu einem Wert $\ell = (2\lambda\Delta(\infty))^{-1}$ numerisch integriert, dann wird $S_2(z,\infty)$ aud der asymptotischen Erhaltungsgröße bestimmt.

Beispiele:

Bild 1: Die Fouriertransformierte $C(\omega,\infty)$ der Korrelationsfunktion für den Ohmschen Fall mit $\alpha = 0.1$. Die Gestrichelte Kurve zeigt den Wert der Korrelationsfunktion, den man nur aus $S_2(z,\ell)$ erhalten hätte. Die kleine durchgezogene Kurve ist $J(\omega,\ell)$, mit einem Faktor 10 skaliert. Man erkennt, daß bei diesem Wert von ℓ offenbar noch eine wesentlicher Anteil in $C(\omega,\ell)$ fehlt. Die obere Abbildung ist für $\lambda = 0.1$, die untere für $\lambda = 0.05$.

Bild 2: Ein Vergleich der beiden Resultate für $\lambda = 0.1$ und $\lambda = 0.05$. Es treten kaum noch Abweichungen auf.

Bild 3: Die Korrelationsfunktion im super-Ohmschen Fall. Man beachte das unterschiedliche Verhalten für kleine ω.

In allen gezeigten Resultaten ist die Summenregel auf etwa 0.5% genau erfüllt.

3.4 Blockdiagonalisierung von Matrizen

Bisher haben wir die Flußgleichungen benutzt, um Matrizen oder Hamiltonoperatoren zu diagonalisieren. In vielen Fällen wird es aber nicht möglich sein, die Flußgleichungen zur Diagonalisierung eines gegebenen Hamiltonoperators zu lösen. In der ersten Arbeit zu diesem Thema von Wegner [3] wurde an dem dort untersuchten Beispiel, wechselwirkende Fermionen in einer Dimension, deutlich, daß die Forderung, für $\ell \to \infty$ einen diagonalen Hamiltonoperator zu bekommen, nicht erreicht werden kann. In dem dort diskutierten Beispiel kam es zu Divergenzen, die möglicherweise daran lagen, daß der Limes $\ell \to \infty$ nicht mit dem thermodynamischen Limes vertauscht. Ein Ausweg bestand darin, den Hamitlonoperator in eine blockdiagonale Form zu bringen.

In vielen Fällen ist es ausreichend, einen gegebenen Hamiltonoperator in eine blockdiagonale Form zu transformieren. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn der Block, der die interessanten Zustände beschreibt, mit anderen Methoden weiterbehandelt werden kann. Es gibt viele bekannte Transformationen, die auf diese Weise einen Hamiltonoperator auf einen effektiven Hamiltonoperator abbilden, der in einem kleineren Hilbertraum operiert und einfacher zu behandeln ist. Beispiele für solche Transformationen sind

- Die Schrieffer-Wolff Transformation, die das Andersonmodell für magnetische Störstellen auf das Kondomodell abbildet.
- Die Foldy-Wouthuysen Transformation, die die Diracgleichung in zwei zweikomponentige Gleichungen entkoppelt, von denen die eine im nicht-relativistischen Grenzfall in die Pauligleichung übergeht.
- Die Fröhlich-Transformation, die aus der Elektron–Phonon Wechselwirkung eine effektive Elektron–Elektron Wechselwirkung herleitet.

Diese Liste erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit, es gibt unzählige weitere Beispiele. Die grundlegende Struktur der Transformation, die in allen diesen Beispielen benutzt wird, ist die Folgende: Ein Hamiltonoperator sei von der Form

$$H = H_0 + H_1 \tag{3.179}$$

wobei H_1 der zu eliminierende Anteil sein soll. Man macht eine unitäre Transformation $H \to e^{iS}He^{-iS}$ und nimmt an, daß S klein ist, so daß die Exponentialfunktionen entwickelt werden können.

$$e^{iS}He^{-iS} = H + i[S,H] - \frac{1}{2}[S,[S,H]] - \frac{i}{6}[S,[S,[S,H]]] + ... \tag{3.180}$$

Man wählt nun S so, daß

$$[S,H_0] = iH_1. \tag{3.181}$$

Wenn dies möglich ist, dann erhält man

$$e^{iS}He^{-iS} = H_0 + \frac{i}{2}[S,H_1] + O(H_1^3). \tag{3.182}$$

In führender Ordnung ist der effektive Hamiltonoperator durch $H_0 + \frac{i}{2}[S, H_1]$ gegeben. Höhere Ordnungen können nach dem gleichen Schema bestimmt werden. Nehmen wir an, H sei eine Matrix der Form

$$H_0 = PHP + QHQ, \quad H_1 = PHQ + QHP \tag{3.183}$$

P und $Q = 1 - P$ seien zwei orthogonale Projektoren. Ziel ist es, H in eine blockdiagonal Form zu transformieren. Offenbar muß $S = PSQ + QSP$ gelten und man erhält

$$PSQHQ + QSPHP - PHQSQ - QHPSP = i(PHQ + QHP). \tag{3.184}$$

Ich nehme an, daß PHP und QHQ diagonalisiert werden können und bezeichne die Eigenwerte mit ϵ_p und ϵ_q. Der Index p durchläuft den zu P gehörigen Teilraum, q entsprechend den zu Q gehörigen Teilraum. Die Matrixelemente von PHQ in dieser Basis notiere ich mit $h_{p,q}$. Die Matrixelemente von S sind dann

$$s_{p,q} = -ih_{p,q}(\epsilon_p - \epsilon_q)^{-1} \tag{3.185}$$

und die Matrixelemente des effektiven Hamiltonoperators in zweiter Ordnung sind

$$\epsilon_p \delta_{p,p'} + \frac{1}{2} \sum_q \frac{h_{p,q} h_{q,p'} (\epsilon_p + \epsilon_{p'} - 2\epsilon_q)}{(\epsilon_p - \epsilon_q)(\epsilon_{p'} - \epsilon_q)} \tag{3.186}$$

Für die Diagonalmatrixelemente ist die gerade das bekannte Resultat aus Störungsrechnung zweiter Ordnung. Man erkennt die für Störungsrechnung typische Nennerstruktur.

Wie kann man eine entsprechende Transformation kontinuierlich durchführen, und welche Unterschiede treten dabei auf? Sei wieder

$$H = PHP + PHQ + QHP + QHQ. \tag{3.187}$$

Ich wähle jetzt

$$\eta = P\eta Q + Q\eta P. \tag{3.188}$$

Die Flußgleichungen lauten damit

$$\frac{dPHP}{d\ell} = P\eta QHP - PHQ\eta P, \tag{3.189}$$

$$\frac{dQHQ}{d\ell} = Q\eta PHQ - QHP\eta P, \tag{3.190}$$

$$\frac{dPHQ}{d\ell} = P\eta QHQ - PHP\eta Q, \tag{3.191}$$

$$\frac{dQHP}{d\ell} = Q\eta PHP - QHQ\eta P. \tag{3.192}$$

Man erhält daraus

$$\frac{d}{d\ell}\mathrm{Tr}PHQHP = \mathrm{Tr}(P\eta Q(QHQHP - QHPHP) + (PHPHQ - PHQHQ)Q\eta P) \tag{3.193}$$

Die Größe $\mathrm{Tr}PHQHP$ sollte monoton fallen. Das ist der Fall, wenn man η wie folgt wählt

$$P\eta Q = PHPHQ - PHQHQ, \quad Q\eta P = QHQHP - QHPHP \tag{3.194}$$

Dann gilt

$$\frac{d}{d\ell}\mathrm{Tr}PHQHP = 2\mathrm{Tr}(P\eta Q\eta P) \leq 0 \tag{3.195}$$

Mit $H_d = PHP + QHQ$ entspricht diese Wahl der ursprünglichen Wahl $\eta = [H_d, H]$. Im Fall der Diagonalisierung einer Matrix mit Hilfe von Flußgleichungen haben wir die Flußgleichungen zunächst iterativ gelöst und gesehen, daß man in zweiter Ordnung das störungstheoretische Resultat reproduziert. Entsprechend möchte ich hier auch vorgehen. Ich nehme wie oben an, daß ich $PHP(0)$ und $QHQ(0)$ diagonalisieren kann und wähle also als Beginn der Iteration

$$\epsilon_p(\ell) = \epsilon_p(0), \quad \epsilon_q(\ell) = \epsilon_q(0),$$

$$h_{p,p'}(\ell) = 0, \quad h_{q,q'}(\ell) = 0,$$

$$h_{pq}(\ell) = h_{pq}(0)\exp(-(\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0))^2\ell), \quad h_{qp}(\ell) = h_{qp}(0)\exp(-(\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0))^2\ell). \tag{3.196}$$

Im ersten Iterationsschritt erhält man dann

$$\epsilon_p(\ell) = \epsilon_p(0) + \sum_q{}' h_{pq}(0)h_{qp}(0)\frac{1 - \exp(-2(\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0))^2\ell)}{\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0)}$$

$$\epsilon_q(\ell) = \epsilon_q(0) + \sum_p{}' h_{qp}(0)h_{pq}(0)\frac{1 - \exp(-2(\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0))^2\ell)}{\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0)} \tag{3.197}$$

Im Limes $\ell \to \infty$ stimmen diese Ergebnisse mit den oben erhlaltenen überein. Für die außerdiagonalen Matrixelemente ergibt sich

$$h_{pp'}(\infty) = \sum_q{}' h_{pq}(0)h_{qp'}(0)\frac{\epsilon_p(0) + \epsilon_{p'}(0) - 2\epsilon_q(0)}{(\epsilon_p(0) - \epsilon_q(0))^2 + (\epsilon_{p'}(0) - \epsilon_q(0))^2}, \tag{3.198}$$

$$h_{qq'}(\infty) = \sum_p{}' h_{qp}(0)h_{pq'}(0)\frac{\epsilon_q(0) + \epsilon_{q'}(0) - 2\epsilon_p(0)}{(\epsilon_q(0) - \epsilon_p(0))^2 + (\epsilon_{q'}(0) - \epsilon_p(0))^2}. \tag{3.199}$$

Diese Resultate stimmen nicht mit den obigen Resultaten überein. Woran liegt das? Zunächst ist klar, daß die Transformation auf eine blockdiagonale Gestalt nicht eindeutig ist. Innerhalb der durch P und Q gegebenen Blöcke können noch unitäre Transformationen durchgeführt werden. Da die außerdiagonalen Matrixelemente in beiden Fällen von der Ordnung $h_{pq}(0)^2$ sind, führen sie zu quartischen Korrekturen in den Eigenwerten. Da die Diagonalelemente aber nur in quadratischer Ordnung berechnet wurden und in quartischer Ordnung voneinander Abweichen können, erhält man formal keinen Widerspruch. Zudem ist klar, daß beide Transformationen verschieden sind. Wenn man die kontinuierliche unitäre Transformation, die durch η gegeben ist, in einem Schritt durchführen will, so muß man vorher ein ℓ–geordnetes Produkt berechnen. Bis in zweiter Ordnung erhält man

$$\exp(\int_0^\ell \eta d\ell' + \frac{1}{2}\int_0^\ell d\ell' \int_0^{\ell'} d\ell''[\eta(\ell'), \eta(\ell'')] + ...) \tag{3.200}$$

Nennt man den Exponenten $\tilde{S}$, so gilt wegen des zweiten Term $P\tilde{S}P \neq 0$ und $Q\tilde{S}Q \neq 0$. Schon in zweiter Ordnung unterscheidet sich S von $\tilde{S}$. Das erklärt die unterschiedlichen Resultate. Für Matrizen, in denen keine Entartungen auftreten, sollten beide Verfahren das gleiche Resultat liefern, wenn man alle höheren Ordnungen mitnimmt. Während im Fall einer einzellnen unitären Transformation die Berechnung von S Ordnung für Ordnung die einzige Möglichkeit zu sein scheint, ist im Fall der Flußgleichungen aber eine bessere Näherung denkbar. Wie wir schon früher gesehen haben, erhält man eine bessere Näherung, wenn man als Startwerte für die

Diagonalmatrixelemente nicht die Anfangswerte, sondern die Endwerte einsetzt. Für die außerdiagonalen Matrixelemente erhält man dann entsprechend

$$h_{pq}(\ell) = h_{pq}(0)\exp(-(\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2\ell), \quad h_{qp}(\ell) = h_{qp}(0)\exp(-(\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2\ell). \tag{3.201}$$

$$\epsilon_p(\ell) = \epsilon_p(\infty) - {\sum_q}' h_{pq}(0)h_{qp}(0)\frac{1-\exp(-2(\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2\ell)}{\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty)} \tag{3.202}$$

$$\epsilon_q(\ell) = \epsilon_q(\infty) - {\sum_p}' h_{qp}(0)h_{pq}(0)\frac{1-\exp(-2(\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2\ell)}{\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty)} \tag{3.203}$$

$$h_{pp'}(\infty) = {\sum_q}' h_{pq}(0)h_{qp'}(0)\frac{\epsilon_p(\infty)+\epsilon_{p'}(\infty)-2\epsilon_q(\infty)}{(\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2+(\epsilon_{p'}(\infty)-\epsilon_q(\infty))^2}, \tag{3.204}$$

$$h_{qq'}(\infty) = {\sum_p}' h_{qp}(0)h_{pq'}(0)\frac{\epsilon_q(\infty)+\epsilon_{q'}(\infty)-2\epsilon_p(\infty)}{(\epsilon_q(\infty)-\epsilon_p(\infty))^2+(\epsilon_{q'}(\infty)-\epsilon_p(\infty))^2}. \tag{3.205}$$

Die Struktur der Gleichungen hat sich nicht geändert. $\epsilon_p(\infty)$ und $\epsilon_q(\infty)$ können selbstkonsistent aus

$$\epsilon_p(\infty) = \epsilon_p(0) + \frac{1}{2}{\sum_q}' \frac{h_{pq}(0)h_{qp}(0)}{\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty)} \tag{3.206}$$

$$\epsilon_q(\infty) = \epsilon_q(0) + \frac{1}{2}{\sum_p}' \frac{h_{qp}(0)h_{pq}(0)}{\epsilon_p(\infty)-\epsilon_q(\infty)} \tag{3.207}$$

bestimmt werden.

3.5 Eine kontinuierliche Schrieffer–Wolff Transformation

Der Kondoeffekt besteht darin, daß Ionen von Übergangsmetallen (e.g. Ce) in einem Metall zu einem anomalen Verhalten verschiedener Größen führen. Beispielsweise zeigt der Widerstand als Funktion der Temperatur ein Minimum bei der Kondotemperatur, für kleinere Temperaturen wächst er wieder an. Das Kondomodell, ein Spin gekoppelt an ein elektronisches Band, wurde intensiv von Wilson mit Hilfe der numerischen Renormierung untersucht.

Ich wende das oben skizierte Verfahren jetzt an, um den Hamiltonoperator des Anderson Modells für magnetische Störstellen in den Kondo–Hamiltonoperator zu transformieren. Der Hamiltonoperator des Anderson Modells lautet

$$H = \sum_{k,\sigma}\epsilon_k : c^\dagger_{k,\sigma}c_{k,\sigma} : + \sum_\sigma \epsilon_d d^\dagger_\sigma d_\sigma + \sum_{k,\sigma} V_k(c^\dagger_{k,\sigma}d_\sigma + d^\dagger_\sigma c_{k,\sigma}) + U d^\dagger_+ d^\dagger_- d_- d_+ + E_0. \tag{3.208}$$

Für $U = 0$ ist das gerade der Hamiltonoperator einer Störstelle in einem Band. Jetzt wird auf der Störstelle eine abstoßende Wechselwirkung U eingeführt. Dieses Modell kann durch die Schrieffer–Wolff Transformation auf das Kondo-Modell abgebildet werden. Für eine entsprechende kontinuierliche Transformation benutze ich

$$\begin{aligned}\eta &= \sum_{k,\sigma}\eta_k(c^\dagger_{k,\sigma}d_\sigma - d^\dagger_\sigma c_{k,\sigma}) + \sum_{k,q,\sigma}\eta_{k,q}(c^\dagger_{k,\sigma}c_{q,\sigma} - c^\dagger_{q,\sigma}c_{k,\sigma}) \\ &\quad + \sum_{k,\sigma}\eta^{(2)}_k(c^\dagger_{k,\sigma}d^\dagger_{-\sigma}d_{-\sigma}d_\sigma - d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma}d_{-\sigma}c_{k,\sigma})\end{aligned} \tag{3.209}$$

$$\begin{aligned}
[\eta, H] &= \sum_{k,\sigma} \eta_k(\epsilon_d - \epsilon_k)(c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma + d^\dagger_\sigma c_{k,\sigma}) \\
&+ \sum_{k,q,\sigma} \eta_k V_q(: c^\dagger_{k,\sigma} c_{q,\sigma} : + : c^\dagger_{q,\sigma} c_{k,\sigma} :) \\
&- 2\sum_{k,\sigma} \eta_k V_k d^\dagger_\sigma d_\sigma + 2\sum_{k,\sigma} \eta_k V_k n_k \\
&+ U\sum_{k,\sigma} \eta_k(d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} + c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma) \\
&- \sum_{k,q,\sigma} \eta_{k,q}(\epsilon_k - \epsilon_q)(: c^\dagger_{k,\sigma} c_{q,\sigma} : + : c^\dagger_{q,\sigma} c_{k,\sigma} :) \\
&+ 2\sum_{k,q,\sigma} \eta_{k,q} V_q(d^\dagger_\sigma c_{k,\sigma} + c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma) \\
&- \sum_{k,\sigma} \eta^{(2)}_k(\epsilon_k - \epsilon_d)(d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} + c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma) \\
&- 2\sum_{k,\sigma} \eta^{(2)}_k V_k d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma \\
&+ \sum_{k,q,\sigma} \eta^{(2)}_k V_q(: c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{q,\sigma} : + : c^\dagger_{q,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} : - : c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_\sigma c_{q,-\sigma} : \\
&\quad - : c^\dagger_{q,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_\sigma c_{k,-\sigma} : - c^\dagger_{k,\sigma} c^\dagger_{q,-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma - d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} c_{q,-\sigma} c_{k,\sigma}) \\
&+ 2\sum_{k,\sigma} \eta^{(2)}_k V_k n_k d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} \\
&+ U\sum_{k,\sigma} \eta^{(2)}_k(d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} + c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma).
\end{aligned} \tag{3.210}$$

Der Ausdruck $[\eta, H]$ enthält einige neue Terme:

- $: c^\dagger_{k,\sigma} c_{q,\sigma} + c^\dagger_{q,\sigma} c_{k,\sigma} :$
  Diese Terme könne wie schon für $U = 0$ durch

  $$\eta_{k,q}(\epsilon_k - \epsilon_q) = \frac{1}{2}(\eta_k V_q + \eta_q V_k). \tag{3.211}$$

  eliminiert werden.

- $d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} + c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma$
  Diese Terme werden durch

  $$U\eta_k + (\epsilon_d - \epsilon_k)\eta^{(2)}_k + U\eta^{(2)}_k = 0 \tag{3.212}$$

  eliminiert.

- Die verbleibenden Terme sind

  $$\begin{aligned}
  &\sum_{k,q,\sigma} \eta^{(2)}_k V_q(: c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{q,\sigma} : + : c^\dagger_{q,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} c_{k,\sigma} : - : c^\dagger_{k,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_\sigma c_{q,-\sigma} : \\
  &\qquad - : c^\dagger_{q,\sigma} d^\dagger_{-\sigma} d_\sigma c_{k,-\sigma} : - c^\dagger_{k,\sigma} c^\dagger_{q,-\sigma} d_{-\sigma} d_\sigma - d^\dagger_\sigma d^\dagger_{-\sigma} c_{q,-\sigma} c_{k,\sigma}).
  \end{aligned} \tag{3.213}$$

> Diese Terme beschreiben die antiferromagnetische Spin–Spin Wechselwirkung zwischen einem Elektron auf der Störstelle und den Elektronen im Band. Sie ist für den Kondo–Effekt verantwortlich. Ich werde diese Terme zunächst vernachlässigen. Die Wechselwirkung wird später berechnet, indem diese Terme aufintegriert werden.

Die Flußgleichungen lauten

$$\frac{dV_k}{d\ell} = \eta_k(\epsilon_d - \epsilon_k) + 2\sum_p \eta_{k,p} V_p \tag{3.214}$$

$$\frac{d\epsilon_k}{d\ell} = 2\eta_k V_k = O(\frac{1}{N}) \tag{3.215}$$

$$\frac{d\epsilon_d}{d\ell} = -2\sum_k \eta_k V_k + 2\sum_k \eta_k^{(2)} V_k n_k \tag{3.216}$$

$$\frac{dU}{d\ell} = -4\sum_k \eta_k^{(2)} V_k \tag{3.217}$$

$$\frac{dE_0}{d\ell} = 4\sum_k \eta_k V_k n_k \tag{3.218}$$

Wie für $U = 0$ führe ich die Funktion

$$J(\epsilon,\ell) = \sum_k V_k^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k) \tag{3.219}$$

ein. Ferner benutze ich die gleichen Näherungen wie früher für $U = 0$:

- Vernachlässige den nicht-linearen Term in der Gleichung für $J(\epsilon,\ell)$ (d.h. den nicht-linearen Term in der Gleichung für V_k.
- Löse die Gleichungen selbstkonsistent, indem auf der rechten Seite U und ϵ_d durch $U(\infty)$ und $\epsilon_d(\infty)$ ersetzt werden.

Für $U = 0$ liefern diese Näherungen die exakte Lösung. Hier erhält man

$$\epsilon_d(\ell) = \epsilon_d(\infty) - \int d\epsilon J(\epsilon,\ell) \frac{\epsilon_d(\infty) - \epsilon + (1 + n(\epsilon))U(\infty)}{(\epsilon_d(\infty) - \epsilon)(\epsilon_d(\infty) - \epsilon + U(\infty))}, \tag{3.220}$$

$$U(\ell) = U(\infty) + 2\int d\epsilon J(\epsilon,\ell) \frac{U(\infty)}{(\epsilon_d(\infty) - \epsilon)(\epsilon_d(\infty) - \epsilon + U(\infty))}. \tag{3.221}$$

Für das Beispiel $J(\epsilon, 0) = \frac{2V^2}{\pi D^2}\sqrt{D^2 - \epsilon^2}$ können alle Integrale berechnet werden. Es gilt

$$\begin{aligned} U(0) \;=\; U(\infty) - \frac{2\Gamma}{D}\Big[& U(\infty) \\ & -\theta(|\epsilon_d(\infty) + U(\infty)| - D)\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty) + U(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty) + U(\infty))^2 - D^2} \\ & +\theta(|\epsilon_d(\infty)| - D)\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty))^2 - D^2}\Big]. \end{aligned} \tag{3.222}$$

Die Resultate für $\epsilon_d(\infty)$ können in verschiedenen Parameterbereichen zusammengefasst werden:

- $|\epsilon_d(\infty)|\,,|\epsilon_d(\infty)+U(\infty)|>D$:
  In diesem Fall erhalten wir

$$\begin{aligned}\epsilon_d(0) &= \epsilon_d(\infty)-\frac{\Gamma}{2D}\Bigg[2\epsilon_d(\infty)-U(\infty)\\ &\quad +\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))^2-D^2}\\ &\quad \left(1-\frac{2}{\pi}\arcsin\frac{D}{\epsilon_d(\infty)+U(\infty)}\right)\\ &\quad -\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty))^2-D^2}\left(3-\frac{2}{\pi}\arcsin\frac{D}{\epsilon_d(\infty)}\right)\Bigg].\end{aligned} \tag{3.223}$$

  Im Limes $U=\infty$, ergibt sich eine einzige Gleichung für $\epsilon_d(\infty)$,

$$\begin{aligned}\epsilon_d(0) &= \epsilon_d(\infty)+\frac{\Gamma}{2D}\Bigg[\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty))^2-D^2}\left(3-\frac{2}{\pi}\arcsin\frac{D}{\epsilon_d(\infty)}\right)\\ &\quad +\frac{2}{\pi}D-3\epsilon_d(\infty)\Bigg].\end{aligned} \tag{3.224}$$

  Sie ähnelt der Gleichung für $U=0$, In beiden Gleichungen gilt $|\epsilon_d(\infty)|>|\epsilon_d(0)|$. Dioe Störstellenenergie wird vom Band weggeschoben, was auch zu erwarten war.

- $|\epsilon_d(\infty)|<D, |\epsilon_d(\infty)+U(\infty)|>D$:
  Jetzt gilt

$$\begin{aligned}\epsilon_d(0) &= \epsilon_d(\infty)-\frac{\Gamma}{2D}\Bigg[2\epsilon_d(\infty)-U(\infty)\\ &\quad +\frac{2}{\pi}\sqrt{D^2-(\epsilon_d(\infty))^2}\ln\left(\frac{\sqrt{D^2-(\epsilon_d(\infty))^2}+D}{|\epsilon_d(\infty)|}\right)\\ &\quad +\mathrm{sign}(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))\sqrt{(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))^2-D^2}\\ &\quad \left(1-\frac{2}{\pi}\arcsin\frac{D}{\epsilon_d(\infty)+U(\infty)}\right)\Bigg].\end{aligned} \tag{3.225}$$

  Für $U=\infty$ vereinfacht sich diese Beziehung zu

$$\begin{aligned}\epsilon_d(0) &= \epsilon_d(\infty)-\frac{\Gamma}{2D}\Bigg[3\epsilon_d(\infty)-\frac{2}{\pi}D\\ &\quad +\frac{2}{\pi}\sqrt{D^2-(\epsilon_d(\infty))^2}\ln\left(\frac{\sqrt{D^2-(\epsilon_d(\infty))^2}+D}{|\epsilon_d(\infty)|}\right)\Bigg].\end{aligned} \tag{3.226}$$

  Im Limes $|\epsilon_d(\infty)|\ll D\ll U$ gilt also

$$\epsilon_d(\infty)=\epsilon_d(0)+\frac{\Gamma}{\pi}\ln\left|\frac{2D}{e\,\epsilon_d(\infty)}\right|+\Gamma\,O(\frac{D}{U(\infty)}). \tag{3.227}$$

  In Bild. 1. ist das numerische Resultat gezeigt. Der Logarithmus auf der rechten Seite von Eq. (3.227) für $\epsilon_d(\infty)\to 0$ sorgt dafür, daß $\epsilon_d(\infty)$ niemals das Ferminiveau erreicht. Falls $\epsilon_d(0)$ negativ ist und hinreichend weit vom Ferminiveau entfernt, so ist $\epsilon_d(\infty)$ ebenfalls negativ. Für wachsendes $\epsilon_d(0)$ wächst auch $\epsilon_d(\infty)$. Bei einem noch negativen Wert von $\epsilon_d(0)$ springt die renmormierte Störstellenenergie von einem Wert unterhalb der Fermikante auf einen Wert oberhalb der Fermikante und wächst dann weiter mit wachsendem $\epsilon_d(0)$. $\epsilon_d(\infty)$ kann nur für $V = 0$ auf dem Ferminiveau liegen.

- $|\epsilon_d(\infty)|\,, |\epsilon_d(\infty) + U(\infty)| < D$:
  Jetzt gilt

$$\begin{aligned}\epsilon_d(0) &= \epsilon_d(\infty) - \frac{\Gamma}{2D}\Bigg[2\epsilon_d(\infty) - U(\infty) + \frac{2}{\pi}\sqrt{D^2 - (\epsilon_d(\infty))^2}\ln\left(\frac{\sqrt{D^2 - (\epsilon_d(\infty))^2} + D}{|\epsilon_d(\infty)|}\right) \\ &\quad -\frac{2}{\pi}\sqrt{D^2 - (\epsilon_d(\infty) + U(\infty))^2}\ln\left(\frac{\sqrt{D^2 - (\epsilon_d(\infty) + U(\infty))^2} + D}{|\epsilon_d(\infty) + U(\infty)|}\right)\Bigg]. \qquad (3.228)\end{aligned}$$

Auch diese Beziehung enthält zwei Logarithmen, die für $\epsilon_d(\infty) \to 0$ oder $\epsilon_d(\infty) + U(\infty) \to 0$ divergieren. Weder $\epsilon_d(\infty)$ noch $\epsilon_d(\infty) + U(\infty)$ erreichen für $V \neq 0$ das Ferminiveau. Für $|\epsilon_d(\infty)| \ll U(\infty) \ll D$ gilt insbesondere

$$\epsilon_d(\infty) = \epsilon_d(0) + \frac{\Gamma}{\pi}\ln\left|\frac{U(\infty)}{\epsilon_d(\infty)}\right| + \Gamma\, O(\frac{U(\infty)}{D}). \qquad (3.229)$$

In (3.229) taucht im Vergleich zu (3.227) $U(\infty)$ als Ultraviolettcutoff auf. (3.229) ist aus Renormierungsgruppenrechnungen bekannt.

Was ergibt sich nun für die Wechselwirkung. Zur Erinnerung: Wir hatten in $[\eta, H]$ Terme der Form

$$\begin{aligned}&\sum_{k,q,\sigma}\eta_k^{(2)}V_q(:c_{k,\sigma}^\dagger d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma}c_{q,\sigma}: + :c_{q,\sigma}^\dagger d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma}c_{k,\sigma}: - :c_{k,\sigma}^\dagger d_{-\sigma}^\dagger d_\sigma c_{q,-\sigma}: \\ &\qquad - :c_{q,\sigma}^\dagger d_{-\sigma}^\dagger d_\sigma c_{k,-\sigma}: - c_{k,\sigma}^\dagger c_{q,-\sigma}^\dagger d_{-\sigma}d_\sigma - d_\sigma^\dagger d_{-\sigma}^\dagger c_{q,-\sigma}c_{k,\sigma}). \qquad (3.230)\end{aligned}$$

weggelassen. Diese Terme beschreiben eine effektive Spin–Spin–Wechselwirkung

$$-2\sum_{k,q}V_{k,q}^{(2)}\ (\psi_k^\dagger\,\frac{1}{2}\vec{\sigma}\,\psi_q)\ \cdot\ (\psi_d^\dagger\,\frac{1}{2}\vec{\sigma}\,\psi_d) \qquad (3.231)$$

mit

$$\psi_k = \begin{pmatrix} c_{k,+} \\ c_{k,-}\end{pmatrix}, \psi_d = \begin{pmatrix} d_+ \\ d_-\end{pmatrix}, \qquad (3.232)$$

und eine Pseudospin–Wechselwirkung. Den Koeffizienten dieser Wechselwirkung berechnen wir approximativ durch

$$\begin{aligned}V_{k,q}^{(2)} &= \int_0^\infty d\ell(\eta_k^{(2)}V_q + \eta_q^{(2)}V_k) \\ &= -\frac{1}{2}\int_0^\infty d\ell V_kV_qU\left(\frac{\frac{\partial \ln J(\epsilon_k,\ell)}{\partial\ell}}{(\epsilon_d - \epsilon_k)(\epsilon_d - \epsilon_k + U)} + \frac{\frac{\partial \ln J(\epsilon_q,\ell)}{\partial\ell}}{(\epsilon_d - \epsilon_q)(\epsilon_d - \epsilon_q + U)}\right). \qquad (3.233)\end{aligned}$$

Benutzt man

$$V_k(\ell) = V_k(0)\sqrt{\frac{J(\epsilon_k,\ell)}{J(\epsilon_k,0)}}. \qquad (3.234)$$

so ergibt sich

$$V_{k,q}^{(2)} = -\frac{1}{2} V_k(0) V_q(0) \int_0^\infty d\ell U (J(\epsilon_k,\ell) J(\epsilon_k,0) J(\epsilon_q,\ell) J(\epsilon_q,0))^{-\frac{1}{2}} \times \left(\frac{\frac{\partial J(\epsilon_k,\ell)}{\partial \ell} J(\epsilon_q,\ell)}{(\epsilon_d-\epsilon_k)(\epsilon_d-\epsilon_k+U)} + \frac{\frac{\partial J(\epsilon_q,\ell)}{\partial \ell} J(\epsilon_k,\ell)}{(\epsilon_d-\epsilon_q)(\epsilon_d-\epsilon_q+U)} \right) \tag{3.235}$$

und weiter mit

$$J(\epsilon,\ell) = J(\epsilon,0) \exp\left(-\int_0^\ell \frac{(\epsilon_d-\epsilon)^2(\epsilon_d-\epsilon+U)^2}{\epsilon_d^2+(\epsilon_d+U)^2} d\ell' \right). \tag{3.236}$$

$$V_{k,q}^{(2)} = \frac{1}{2} V_k(0) V_q(0) \int_0^\infty d\ell\, U \frac{(\epsilon_d-\epsilon_k)(\epsilon_d-\epsilon_k+U)+(\epsilon_d-\epsilon_q)(\epsilon_d-\epsilon_q+U)}{\epsilon_d^2+(\epsilon_d+U)^2} \times \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^\ell \left(\frac{(\epsilon_d-\epsilon_k)^2(\epsilon_d-\epsilon_k+U)^2}{\epsilon_d^2+(\epsilon_d+U)^2} + \frac{(\epsilon_d-\epsilon_q)^2(\epsilon_d-\epsilon_q+U)^2}{\epsilon_d^2+(\epsilon_d+U)^2} \right) d\ell' \right) \tag{3.237}$$

Ersetzt man U und ϵ_d wie früher auch schon durch die Werte bei $\ell = \infty$, so ergibt sich

$$V_{k,q}^{(2)} = V_k(0) V_q(0) U(\infty) \times \frac{(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_k)(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_k+U(\infty))+(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q)(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q+U(\infty))}{(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_k)^2(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_k+U(\infty))^2+(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q)^2(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q+U(\infty))^2}. \tag{3.238}$$

Dieser Ausdruck sollte eine gute Näherung sein, solange $\epsilon_d(\infty)$ und $\epsilon_d(\infty)+U(\infty)$ nicht in der Nähe von ϵ_k oder ϵ_q liegen. Dies gilt speziell für die Fermikante. Direkt an der Fermikante erhält man

$$V_{k_F,k_F}^{(2)} = V_{k_F}(0)^2 \frac{U(\infty)}{\epsilon_d(\infty)(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))}, \tag{3.239}$$

und wenn nur k an der Fermikante liegt

$$V_{k_F,q}^{(2)} = V_{k_F}(0)\, V_q(0)\, U(\infty) \frac{\epsilon_d(\infty)(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))+(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q)(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q+U(\infty))}{(\epsilon_d(\infty))^2(\epsilon_d(\infty)+U(\infty))^2+(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q)^2(\epsilon_d(\infty)-\epsilon_q+U(\infty))^2}. \tag{3.240}$$

Diese Ausdrücke können mit den Ergebnissen aus der normalen Schrieffer–Wolff Transformation verglichen werden. Dort erhält man

$$V_{k,q}^{(2)} = \frac{1}{2}\, V_k(0)\, V_q(0)\, U(0) \left(\frac{1}{(\epsilon_d(0)-\epsilon_k)(\epsilon_d(0)-\epsilon_k+U(0))} + \frac{1}{(\epsilon_d(0)-\epsilon_q)(\epsilon_d(0)-\epsilon_q+U(0))} \right), \tag{3.241}$$

also an der Fermikante

$$V_{k_F,k_F}^{(2)} = V_{k_F}(0)^2 \frac{U(0)}{\epsilon_d(0)(\epsilon_d(0)+U(0))}. \tag{3.242}$$

Ein wesentlicher Unterschied besteht zunächst darin, daß in den Schrieffer–Wolff Resultaten die unrenormierten Energien auftreten, während in unseren Resultaten die renormierten Werte stehen. Das ist natürlich auch zu erwarten. Die physikalischen Werte sind die renormierten Werte.

Selbst wenn man im Schrieffer–Wolff Resultat die unrenormierten durch die renormierten Werte ersetzt, ergibt sich ein weiterer Unterschied. Ich betrachte dazu in $V^{(2)}_{k_F,q}$ den Limes

$$V^{(2)}_{k_F,q} \stackrel{|\epsilon_q|\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2}\, V_{k_F}(0)\, V_q(0)\, \frac{U(0)}{\epsilon_d(0)(\epsilon_d(0)+U(0))} \neq 0. \tag{3.243}$$

während in unserem Resultat diese Größe verschwindet. Das sollte auch der Fall sein, da der effektive Hochenergie-cutoff (für $D \gg U(\infty)$) nicht D, sondern $U(\infty)$ ist. Die folgenden Grafiken machen das deutlich:

Bild 1: Vergleich zwischen den Resultaten für $V^{(2)}_{k_F,q}$ im symmetrischen Fall ($U = -2\epsilon_d$). Die durchgezogene Linie zeigt das Resultat der Flußgleichungen, die gestrichelte Linie zeigt das Resultat von Schrieffer und Wolff, wobei die renormierten Werte von U und ϵ_d eingesetzt wurden.

Bild 2: Vergleich zwischen den Resultaten für $V^{(2)}_{k_F,q}$ im Fall $U = \infty$.

Man erkennt in beiden Fällen, daß zum einen die Divergenz verschindet, zum anderen das Verhalten für große ϵ_q deutlich verschieden ist.

Der Unterschied zwischen dem Flu
ssgleichungsverfahren, der Schrieffer–Wolff Transformation und der störungstheoretischen Renormierung kann leicht an der Behandlung von $J(\omega, 0)$ deutlich gemacht werden. Die Abbildung zeigt, wie sich in den drei Verfahren $J(\omega, 0)$ ändert.

3.6 Eliminierung der Elektron–Phonon Wechselwirkung

Ähnlich wie im Fall der Schrieffer–Wolff Transformation wird im Fall der Fröhlich Transformation in einem Modell mit dem Hamiltonoperator

$$H = \sum_q \omega_q a^\dagger_q a_q + \sum_k \epsilon_k c^\dagger_k c_k + \sum_{k,q} M_q (a^\dagger_{-q} + a_q) c^\dagger_{k+q} c_k \tag{3.244}$$

die Elektron–Phonon Wechselwirkung eliminiert. Man erzeugt auf diese Weise unter anderem eine attraktive Elektron–Elektron Wechselwirkung, die für die Supraleitung verantwortlich ist. Fröhlich führt die Transformation

$$H \to e^S H e^{-S} \approx H + [S, H] + \frac{1}{2}[S, [S, H]] + ... \tag{3.245}$$

mit

$$S = \sum_{k,q} M_q \left(\frac{1}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \omega_q} a^\dagger_{-q} + \frac{1}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \omega_q} a_q \right) c^\dagger_{k+q} c_k \tag{3.246}$$

durch und erhält so eine Eliminierung der Elektron–Phonon Wechselwirkung in führender Ordnung und eine effektive Elektron–Elektron Wechselwirkung der Form

$$\sum_{k,k',\delta} V^F_{k,k',\delta} c^\dagger_{k+\delta} c^\dagger_{k'-\delta} c_{k'} c_k \tag{3.247}$$

mit

$$V^F_{k,k',\delta} = M^2_\delta \frac{\omega_\delta}{(\epsilon_{k+\delta} - \epsilon_k)^2 - \omega^2_\delta}. \tag{3.248}$$

Aufgrund der Resultate aus dem vorangegangenen Abschnitt erwarten wir, daß man in diesem Fall mit Erfolg eine kontinuierliche unitäre Transformation durchführen kann, und daß man als Resultat eine effektive Elektron–Elektron Wechselwirkung bekommt, die weniger singulär ist. Die Rechnung ist in der Diplomarbeit von Peter Lenz durchgeführt worden, siehe [14]. Ich gebe hier nur das Resultat an, das man aus den Flußgleichungen mit Näherungen erhält, die analog zu den Näherungen aus dem vorangegangenen Abschnitt sind:

$$V_{k,k',\delta} = -M_\delta^2 \left(\frac{\beta_{k',-\delta}}{\alpha_{k,\delta}^2 + \beta_{k',-\delta}^2} - \frac{\alpha_{k',-\delta}}{\beta_{k,\delta}^2 + \alpha_{k',-\delta}^2} \right) \tag{3.249}$$

mit $\alpha_{k,\delta} = \epsilon_{k+\delta} - \epsilon_k + \omega_\delta$, $\beta_{k,\delta} = \epsilon_{k+\delta} - \epsilon_k - \omega_\delta$. Speziell für die Wechselwirkung eines Cooperpaares ergibt sich also

$$V_{k,-k,\delta} = -M_\delta^2 \frac{\omega_\delta}{(\epsilon_{k+\delta} - \epsilon_k)^2 + \omega_\delta^2}. \tag{3.250}$$

Im Vergleich zu dem Resultat von Fröhlich tritt keine Singularität und kein Vorzeichenwechsel auf.

In diesem Fall ist es leider nicht möglich, aus physikalischen Gründen einer Form der effektiven Wechselwirkung den Vorzug zu geben. Während im Fall der Schrieffer–Wolff Transformation das Resultat aus der kontinuierlichen Transformation das richtige ist, hat man im vorliegenden Fall keine Kriterien dafür, diesen Schluß zu ziehen, außer der Eigenschaft, daß $V_{k,k',\delta}$ weniger singulär ist als $V^F_{k,k',\delta}$. Da wir aber im Fall der Schrieffer–Wolff Transformation gesehen haben, daß die Flußgleichungen deutlich bessere Resultate liefern, können wir davon ausgehen, daß dies hier auch gilt. Eine Untersuchung der Frage, welchen Effekt die andere Form der Wechselwirkung auf Erwartungswerte hat, steht noch aus. Dazu müssen, wie schon im Fall des Spin–Boson Modells, die Observablen transformiert werden. Im vorliegenden Fall werden z.B. die elektronischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren transformiert. Es ist möglich, daß diese ähnlich wie σ_z im Spin–Boson Modell vollständig zerfallen. Damit hätte man als Konsequenz endliche Zerfallszeit für Cooperpaare und ähnliches. Es wäre sicher interessant, diese offenen Fragen zu untersuchen.

Kapitel 4

Kontinuierliche unitäre Transformationen: Renormierung von Hamiltonoperatoren

Vor zwei bis drei Jahren haben Glazek und Wilson [4, 5] ein Renormierungsverfahren vorgeschlagen, daß den Flußgleichungen sehr verwandt ist. Sie nennen dieses Verfahren *similarity renormalization scheme*. Die Gemeinsamkeiten und Unterschiede sind
Gemeinsamkeiten

- Das Verfahren von Glazek und Wilson arbeitet auf der Basis von Hamiltonoperatoren. Die Motivation ist, gebundene Zustände in der QCD zu beschreiben. Gebundene Zustände lassen sich eher in einer Hamiltonschen Formulierung beschreiben als in einer feldtheoretischen Formulierung.

- Zur Renormierung wird der Hamiltonoperator unitär transformiert. Dies ist nur approximativ möglich.

- Durch die Transformation werden höhere Wechselwirkungen erzeugt.

Unterschiede

- Ziel ist es, den Hamiltonoperator in eine band–diagonale Form zu transformieren. Eine Möglichkeit besteht darin, $\beta > 1$ zu wählen und außerdiagonale Matrixelemente zu eliminieren, wenn für die entsprechenden Diagonalmatrixelemente E_i und E_j ($E_i \leq E_j$ für $i < j$, $E_0 \geq 0$) die Beziehung

  $$(\beta + 1)\,|E_i - E_j| > (\beta - 1)(E_i + E_j) + 2E_0 \tag{4.1}$$

  gilt. Der Hamiltonoperator wird also nicht diagonalisiert, um daß Problem zu lösen, muß der renormierte Hamiltonoperator mit anderen Verfahren weiterbehandelt werden.

- (4.1) sorgt dafür, daß in einer störungstheoretischen Berechnung der unitären Transformation kleine Energienenner explizit vermieden werden.

Ich werde im folgenden zunächst die Variante vorstellen, die eine einzige unitäre Transformation benutzt. In einem zweiten Abschnitt wird die kontinuierliche Variante diskutiert.

4.1 Unitäre Renormierung I

Die Ausführungen in diesem Abschnitt basieren im wesentlichen auf [4].

Gegeben sei ein Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_I \tag{4.2}$$

der einen UV-cutoff Λ enthält. H_0 ist der freie Anteil, H_I enthält die unrenormierten Wechselwirkungen und notwendige Counterterme. Solange die richtigen Counterterme nicht gefunden sind, werden die Eigenwerte und die Eigenvektoren von H in einer störungstheoretischen Rechnung eine starke Λ–Abhängigkeit zeigen.

Die Idee besteht darin, H einer unitären Transformation zu unterwerfen. Diese transformierte Hamiltonoperator sei

$$H' = S^{-1} H S \tag{4.3}$$

mit $S^\dagger = S^{-1}$. Wir schreiben

$$S = 1 + T \tag{4.4}$$

mit $T \to 0$ für $H_I \to 0$. Da S unitär sein soll, muß für T

$$T + T^\dagger + T^\dagger T = 0 \tag{4.5}$$

gelten. Ich schreibe T in der Form $T = a + h$, wobei $h = \frac{1}{2}(T + T^\dagger)$ der hermitesche und $a = \frac{1}{2}(T - T^\dagger)$ der antihermitesche Anteil von T ist. Die Bedingung für T lautet dann

$$h = \frac{1}{2}(a^2 - h^2) \tag{4.6}$$

h ist also von höherer Ordnung in H_I als a.

Den neuen Wechselwirkungshamiltonoperator H'_I führen Glazek und Wilson so ein, daß der freie Anteil H_0 im Hamiltonoperator unverändert bleibt: $H'_I = H' - H_0$. Dann gilt

$$H'_I = H_I + T^\dagger H + HT + T^\dagger HT. \tag{4.7}$$

Um die Tranformation zu definieren, führen Glazek und Wilson zunächst die Eigenwerte von H_0 ein, $H_0|i >= E_i|i >$. Jede Matrix M wird in zwei Teile zerlegt,

$$M = D(M) + R(M) \tag{4.8}$$

wobei

$$R(M)_{i,j} = M_{i,j} \tag{4.9}$$

genau dann gilt, wenn (4.1) gilt,

$$(\beta + 1)\,|E_i - E_j| > (\beta - 1)(E_i + E_j) + 2E_0.$$

Entsprechend ist

$$D(M)_{i,j} = M_{i,j} \quad \text{falls} \quad (\beta + 1)\,|E_i - E_j| \leq (\beta - 1)(E_i + E_j) + 2E_0. \tag{4.10}$$

Für H'_I fordert man

$$R(H'_I) = 0 \tag{4.11}$$

Das führt zu

$$R(H_I + [H_0, h]_+ + [H_0, a] + T^\dagger H_i + H_I T + T^\dagger H_I T) = 0. \tag{4.12}$$

Diese Bedingung kann erfüllt werden, wenn man

$$[a, H_0] = R(H_I + [H_0, h]_+ + T^\dagger H_i + H_I T + T^\dagger H_I T) \tag{4.13}$$

fordert. Aus dieser Gleichung kann a in beliebiger Ordnung bestimmt werden, in dem man beispielsweise iterativ vorgeht. Hat man a bestimmt, so erhält man für H'_I

$$H'_I = D(H_I + [H_0, h]_+ + T^\dagger H_i + H_I T + T^\dagger H_I T). \tag{4.14}$$

Das Argument auf der rechten Seite von (4.13) und (4.14) ist das gleiche, wir nennen es Q. Drückt man H_I auf der rechten Seite von Q außer im ersten Term durch H'_I aus, so erhält man

$$Q = H_I - [H_0, h]_+ + H'_I(a - h) - (a + h)H'_I + (a + h)H'(a - h). \tag{4.15}$$

Diese Gleichungen werden rekursiv gelöst.

Sei

$$H_I = gV_1 + g^2V_2 + g^3V_3 + ... \tag{4.16}$$

und entsprechend

$$H'_I = gV'_1 + g^2V'_2 + g^3V'_3 + ... \tag{4.17}$$

$$a = ga_1 + g^2a_2 + g^3a_3 + ... \tag{4.18}$$

$$h = g^2h_2 + g^3h_3 + ... \tag{4.19}$$

mit

$$h_n = \frac{1}{2} \sum_{k \le n} (a_k a_{n-k} - h_k h_{n-k}) \,. \tag{4.20}$$

$$Q = gQ_1 + g^2Q_2 + g^3Q_3 + ... \tag{4.21}$$

Damit findet man

$$\begin{aligned} Q_n \quad = \quad & V_n - [H_0, h_n] + \sum_{k=1}^{n-1} V'_k(a_{n-k} - h_{n-k}) \\ & - \sum_{k=1}^{n-1} (a_{n-k} + h_{n-k})V'_k + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k + h_k)H_0(a_{n-k} - h_{n-k}) \\ & + \sum_{k=1}^{n-2} \sum_{l=1}^{n-1-k} (a_k + h_k)V'_l(a_{n-k-l} - h_{n-k-l}) \end{aligned} \tag{4.22}$$

Q_n wird nur aus Termen konstruiert, die zu einem niedrigeren Index gehören, außer dem ersten Term, der bekannt ist, und dem zweiten, in dem h_n auch aus Termen zu niedrigerem Index bestimmt wird. Aus Q_n erhält man

$$V'_n = D(Q_n) \tag{4.23}$$

$$a_{nij} = \frac{R(Q_n)_{ij}}{E_j - E_i} \tag{4.24}$$

Diese Ausdrücke sind zunächst störungstheoretischer Natur. Das wesentliche ist aber, daß durch die Wahl von $D(\,.\,)$ kleine Energienenner explizitvermieden werden. Da der Zähler in dem Ausdruck für a_n nur dann $\neq 0$ ist, wenn (4.1) erfüllt ist, gilt in dem Ausdruck für a immer

$$|E_i - E_j| > \frac{\beta - 1}{\beta + 1}(E_i + E_j) + \frac{2E_0}{\beta + 1} \tag{4.25}$$

Energiedifferenzen sind also von der Ordnung der Summen der beiden Energien.

Ein Problem dieses Verfahrens besteht darin, daß die Energien E_i oder der freie Hamiltonoperator H_0 nicht renormiert wird. Wendet man das Verfahren beispielsweise auf das Spin–Boson Modell an, so steckt die Renormierung von Δ in H_I und nicht in H_0. Eine Renormierung von H_0 erhält man nur dann, wenn man wie sonst auch mehrere Renormierungsschritte hintereinander durchführt. Glazek und Wilson führen deshalb ein kontinuierliches Verfahren ein, daß von der Struktur her genauso funktioniert, aber eine Renormierung der E_i beinhaltet.

4.2 Unitäre Renormierung II, kontinuierliche Transformationen

Die Ausführungen in diesem Abschnitt basieren im wesentlichen auf [5].

In diesem Verfahren wird der Ultraviolett–cutoff kontinuierlich verändert. Der Hamiltonoperator H_λ (und alle anderen Größen) sind dann von einem kontinuierlichen Parameter λ abhängig. H_λ soll keine Übergänge zwischen Zuständen enthalten, deren Energiedifferenz deutlich größer als λ ist.

Ich definiere zuerst die Aufteilung $M = D(M) + R(M)$ etwas flexibler. Seien $E_{i\lambda}$ die Eigenwerte von $H_{0\lambda}$. Sei

$$x_{ij\lambda} = \frac{E_{i\lambda} - E_{j\lambda}}{E_{i\lambda} + E_{j\lambda} + \lambda} \tag{4.26}$$

und

$$u_{ij\lambda} = u(x_{ij\lambda}), \quad r_{ij\lambda} = 1 - u_{ij\lambda} = r(x_{ij\lambda}). \tag{4.27}$$

$u(x) = u(|x|)$ ist eine Funktion, die für kleine Argumente 1 ist und für große Argumente verschwindet. Konkret kann man $u(x)$ wie folgt wählen:

$$u(x) = 1 \quad \text{für} \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{3},$$

$$u(x) \text{ fällt monoton von 1 auf 0 für } \quad \frac{1}{3} \leq x \leq \frac{2}{3},$$

$$u(x) = 0 \quad \text{für} \quad \frac{2}{3} \leq x \leq 1. \tag{4.28}$$

Zusätzlich wird angenommen, daß $u(x)$ beliebig oft stetig differenzierbar ist. Ich definiere jetzt $D(M)_{ij} = u_{ij\lambda} D_{ij}$ und entsprechend $R(M)_{ij} = r_{ij\lambda} D_{ij}$. Indem man $u_{ij\lambda}$ und $r_{ij\lambda}$ einführt, erhält man einen kontinuierlichen Übergang zwischen $D(M)$ und $R(M)$. Das ist wichtig um in den Renormierungsgleichungen Divergenzen zu vermeiden. Wählt man $u(x) = \theta(x_0 - x)$, so erhält man die ursprüngliche Definition von $D(M)$ und $R(M)$.

Die kontinuierliche unitäre Transformation kann wie früher schon in der Form

$$\frac{dH_\lambda}{d\lambda} = [\eta_\lambda, H_\lambda] \tag{4.29}$$

geschrieben werden. η_λ wird so gewählt, daß $D(H_\lambda) = H_\lambda$. Wie vorher ist es sinnvoll, einen Operator Q einzuführen, so daß

$$H_\lambda = D(Q_\lambda) \tag{4.30}$$

Für die Matrixelemente gilt dann

$$\frac{du_{ij\lambda}}{d\lambda}Q_{ij\lambda} + u_{ij\lambda}\frac{dQ_{ij\lambda}}{d\lambda} = \eta_{ij\lambda}(E_{i\lambda} - E_{j\lambda}) + [\eta_\lambda, H_{I\lambda}]_{ij}. \tag{4.31}$$

Aus dieser Gleichung können Q_λ und η_λ noch nicht bestimmt werden. Der Grund liegt darin, daß für gegebenes λ H_λ noch unität transformiert werden kann, ohne daß die Bedingung $D(H_\lambda) = H_\lambda$ verletzt wird. Man benötigt also eine weitere Bedingung. Dazu wird die obige Gleichung umgeschrieben

$$u_{ij\lambda}\frac{dQ_\lambda}{d\lambda} - \eta_{ij\lambda}(E_{i\lambda} - E_{j\lambda}) = G_{ij\lambda} \tag{4.32}$$

mit

$$G_{ij\lambda} \stackrel{\text{def}}{=} [\eta_\lambda, H_{I\lambda}]_{ij} - \frac{du_{ij\lambda}}{d\lambda}Q_\lambda \tag{4.33}$$

Sei nun

$$u_{ij\lambda}\frac{dQ_\lambda}{d\lambda} = D(G_\lambda)_{ij} \tag{4.34}$$

und

$$\eta_{ij\lambda}(E_{i\lambda} - E_{j\lambda}) = -R(G_\lambda)_{ij} \tag{4.35}$$

Damit sind alle Größen bestimmt. Man erhält

$$\eta_{ij\lambda} = \frac{r_{ij\lambda}}{E_{i\lambda} - E_{j\lambda}}\left([\eta_\lambda, H_{I\lambda}]_{ij} - \frac{du_{ij\lambda}}{d\lambda}\frac{H_{ij\lambda}}{u_{ij\lambda}}\right) \tag{4.36}$$

und

$$\frac{dH_{ij\lambda}}{d\lambda} = u_{ij\lambda}[\eta_\lambda, H_{I\lambda}]_{ij} + r_{ij\lambda}\frac{du_{ij\lambda}}{d\lambda}\frac{H_{ij\lambda}}{u_{ij\lambda}}. \tag{4.37}$$

In diesen Gleichungen treten wieder keine kleinen Energienenner auf. Diese Gleichungen müssen wie früher schon iterativ gelöst werden.

4.3 Ein Anwendungsbeispiel

In den Arbeiten aus der Gruppe um Wilson finden sich mehrere Anwendungen dieses Renormierungsverfahrens. In allen diesen Arbeiten wird das Verfahren aber auf Modelle in Lichtkegeleichung angewandt. Diese Modelle sind als Beispiel für diese Vorlesung ungeeignet, sie würden den Rahmen der Vorlesung sprengen. Ich verweise hier nur auf einige aktuelle Arbeiten:

- R. Perry Hamiltonian light–front field theory and quantum chromodynamics. hep–th/9407056

- R. Perry: A simple confinement mechanism for light–front quantum chromodynamics. hep–th/9411037
- M. Brisudova, R. Perry: Initial bound state studies in light–front QCD hep–th/9511443
- B.D. Jones, R. Perry, S.D. Glazek: Nonperturbative QED: An analytical treatment on the light front. hep–th/9605231

Diese Liste ist nicht vollständig. Weitere Arbeiten findet man dort zitiert oder auf dem preprint–server in Los Alamos.

Statt dessen möchte ich hier das Verfahren auf ein einfaches Modell anwenden. Der Hamiltonoperator sei

$$H_\lambda = H_{0\lambda} + H_{I\lambda} \tag{4.38}$$

$$H_{0\lambda} = \sum_k \epsilon_{k\lambda} : c_k^\dagger c_k : + \sum_q \omega_{q\lambda} : b_q^\dagger b_q : \tag{4.39}$$

$$H_{I\lambda} = \sum_{k,q} (g_{k,q,\lambda} c_k^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger + g_{k,q,\lambda}^* c_{k+q}^\dagger c_k b_q) + O(g^2) \tag{4.40}$$

$c_k^\dagger$, c_k sind fermionische Operatoren, $b_q^\dagger$, b_q beschreiben Bosonen. Ich nehme $\omega_{q\lambda} \geq 0$ an. H_I enthält in führender Ordnung eine Fermion-Boson Wechselwirkung. Für großen cutoff Λ soll diese Kopplung nicht von k abhängen, d.h. $g_{k,q,\Lambda} = g_{q,\Lambda}$. Die Terme $O(g^2)$ sind die Counterterme, also hier weitere Wechselwirkungen. Ferner sei $\omega_{q\lambda} = \omega_{q\lambda}$, $\epsilon_{k\lambda} = \epsilon_{-k\lambda}$. Für großen cutoff soll

$$g_{kq\Lambda} = g_{k+q,-q\Lambda}^* = g_{q\Lambda} \tag{4.41}$$

gelten.

Dieses Modell soll jetzt mit Hilfe der Gleichungen (4.36, 4.37) untersucht werden. Ich berechne alle Größen als Entwicklungen in g. Wegen (4.36) kann η_λ in führender Ordnung in der Form

$$\eta_\lambda = \sum_{k,q} (\eta_{k,q,\lambda} c_k^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger - \eta_{k,q,\lambda}^* c_{k+q}^\dagger c_k b_q) + O(g^2) \tag{4.42}$$

geschrieben werden. $\eta_{k,q,\lambda} = O(g)$. Sei

$$x_{k,q,\lambda} = \frac{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}}{|\epsilon_{k\lambda}| + |\epsilon_{k+q\lambda}| + \omega_{q\lambda} + \lambda} \tag{4.43}$$

Man erhält dann

$$\eta_{k,q,\lambda} = -\frac{r(x_{k,q,\lambda})}{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}} \frac{d \ln u(x_{k,q,\lambda})}{d\lambda} g_{k,q,\lambda} \tag{4.44}$$

Aus (4.37) ergibt sich, daß die Energien $\epsilon_{k\lambda}$ und $\omega_{q\lambda}$ erst in zweiter Ordnung in g renormiert werden.

Der erste Term in (4.37) ist von Ordnung g^2. Er enthält Beiträge zum Fluß der Einteilchenenergien und neue Wechselwirkungen zu $H_{I\lambda}$. Der zweite Term in (4.37) ist von Ordnung g und trägt zum Fluß von $g_{k,q,\lambda}$ bei. Die Flußgleichung lautet

$$\frac{dg_{k,q,\lambda}}{d\lambda} = r(x_{k,q,\lambda}) \frac{d \ln u(x_{k,q,\lambda})}{d\lambda} g_{k,q,\lambda} + O(g^3) \tag{4.45}$$

Sie wird durch den Ansatz

$$g_{k,q,\lambda} = g_{k,q,\Lambda}\frac{e(x_{k,q,\lambda})}{e(x_{k,q,\Lambda})} \tag{4.46}$$

gelöst, wobei $e(x)$ aus $\frac{1}{e}\frac{de}{dx} = \frac{r}{u}\frac{du}{dx}$ bestimmt wird. Beachtet man $r = 1 - u$, so kann man die Lösung in der Form

$$e(x) = u(x)\exp(r(x)) \tag{4.47}$$

schreiben. $e(x)$ hat ähnliche Eigenschaften wie $u(x)$: $e(x) = 1$ falls $u(x) = 1$, $e(x) = 0$ falls $u(x) = 0$, $e(x)$ fällt monoton in dem Bereich, in dem $u(x)$ monoton fällt. Ich nehme im folgenden an, daß der cutoff Λ so groß gewählt werden kann, daß $e(x_{kq\Lambda}) = 1$ für alle k, q gilt.

Als nächstes berechnen wir die höheren Kopplungen in H_I. Dazu muß $[\eta_\lambda, H_{I\lambda}]$ berechnet werden. Es gilt

$$\begin{aligned}
[\eta_\lambda, H_{I\lambda}] &= \sum_{k,q}\sum_{k',q'} \eta_{kq\lambda}(g_{k'q'\lambda}[c_k^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger, c_{k'}^\dagger c_{k'+q'} b_{q'}^\dagger] + g_{k'q'\lambda}^*[c_k^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger, c_{k'+q'}^\dagger c_{k'} b_{q'}]) \\
&\quad + \text{ h.c. } + O(g^3) \\
&= \sum_{k,q}\sum_{k',q'} \eta_{kq\lambda} g_{k'q'\lambda}(: c_k^\dagger c_{k+q+q'} b_q^\dagger b_{q'}^\dagger : \delta_{k',k+q} - : c_{k-q'}^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger b_{q'}^\dagger : \delta_{k',k-q'} \\
&\qquad + (n_k - n_{k+q}) : b_q^\dagger b_{-q}^\dagger : \delta_{q,-q'}\delta_{k',k+q}) \\
&+ \sum_{k,q}\sum_{k',q'} \eta_{kq\lambda} g_{k'q'\lambda}^*(: c_k^\dagger c_{k+q-q'} b_q^\dagger b_{q'} : \delta_{k',k+q-q'} - : c_{k+q'}^\dagger c_{k+q} b_q^\dagger b_{q'} : \delta_{k',k} \\
&\qquad + (n_k - n_{k+q}) : b_q^\dagger b_q : \delta_{q,q'}\delta_{k',k} \\
&\qquad - : c_k^\dagger c_{k'+q}^\dagger c_{k'} c_{k+q} : \delta_{q,q'} \\
&\qquad - (1 + n_k) : c_{k+q}^\dagger c_{k+q} : \delta_{q,q'}\delta_{k',k} + n_{k+q} : c_k^\dagger c_k : \delta_{q,q'}\delta_{k',k} \\
&\qquad - (1 + n_k) n_{k+q}\delta_{q,q'}\delta_{k',k}) + \text{ h.c. } + O(g^3)
\end{aligned} \tag{4.48}$$

Dieser Ausdruck liefert mit (4.37) die Renormierung von $\omega_{q\lambda}$ und $\epsilon_{k\lambda}$. Zunächst für $\omega_{q\lambda}$:

$$\frac{d\omega_{q\lambda}}{d\lambda} = \sum_k (\eta_{kq\lambda} g_{kq\lambda}^* + \eta_{kq\lambda}^* g_{kq\lambda})(n_k - n_{k+q}) \tag{4.49}$$

Aus (4.44) und der Definition von $e(x)$ erhält man

$$\eta_{kq\lambda} = -\frac{g_{kq\lambda}}{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d\ln e(x_{k,q,\lambda})}{d\lambda} \tag{4.50}$$

und damit

$$\begin{aligned}
\frac{d\omega_{q\lambda}}{d\lambda} &= \sum_k \frac{n_k - n_{k+q}}{\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d\ln e^2(x_{k,q,\lambda})}{d\lambda}|g_{kq\lambda}|^2 \\
&= \sum_k \frac{n_k - n_{k+q}}{\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d|g_{kq\lambda}|^2}{d\lambda}.
\end{aligned} \tag{4.51}$$

Die Änderung von $\epsilon_{k\lambda}$ und $\omega_{q\lambda}$ ist $O(g^2)$. Vernachlässigt man also die λ–Abhängigkeit in dem Ausdruck $\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}$, so erhält man

$$\omega_{q\lambda} = \omega_{q\Lambda} + \sum_k \frac{n_k - n_{k+q}}{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}}|g_{kq\Lambda}|^2(1 - e^2(x_{k,q,\lambda})) \tag{4.52}$$

In ähnlicher Weise bekommt man für $\epsilon_{k\lambda}$

$$\begin{aligned}\frac{d\epsilon_{k\lambda}}{d\lambda} &= \sum_q (\eta_{kq\lambda} g^*_{kq\lambda} n_{k+q} + \eta^*_{kq\lambda} g_{kq\lambda} n_{k+q} \\ &\quad -\eta_{k+q,-q\lambda} g^*_{k+q,-q\lambda}(n_{k+q}+1) - \eta^*_{k+q,-q\lambda} g_{k+q,-q\lambda}(n_{k+q}+1)) \\ &= -\sum_q \frac{n_{k+q}}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{d\left|g_{kq\lambda}\right|^2}{d\lambda} + \sum_q \frac{n_{k+q}+1}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{d\left|g_{k+q,-q\lambda}\right|^2}{d\lambda} \end{aligned} \tag{4.53}$$

und in gleicher Näherung wie oben

$$\begin{aligned}\epsilon_{k\lambda} &= \epsilon_{k\Lambda} + \sum_q \frac{n_{k+q}}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}} \left|g_{kq\Lambda}\right|^2 (1-e^2(x_{k,q,\lambda})) \\ &\quad -\sum_q \frac{n_{k+q}+1}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}} \left|g_{k+q,-q\Lambda}\right|^2 (1-e^2(x_{k+q,-q,\lambda}))\end{aligned} \tag{4.54}$$

Die beiden Gleichungen (4.52) und (4.54) können zur selbstkonsistenten Berechung der renormierten Einteilchenenergien benutzt werden.

In $[\eta_\lambda, H_{I\lambda}]$ treten aber weitere Terme auf, die neue Kopplungen enthalten. Damit findet man

$$\begin{aligned}H_{I\lambda} &= \sum_{k,q} (g_{kq\lambda} c^\dagger_k c_{k+q} b^\dagger_q + g^*_{kq\lambda} c^\dagger_{k+q} c_k b_q) \\ &\quad + \sum_{k,k',q} V_{kk'q\lambda} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k'-q} c_{k'} c_k : \\ &\quad + \sum_q c_q b^\dagger_q b^\dagger_{-q} \\ &\quad + \text{Kopplungen der Elektronen an zwei Bosonen.}\end{aligned} \tag{4.55}$$

Ich berechne die Flußgleichung für die Kopplung $V_{k,k',q}$. Sei

$$x_{kk'q\lambda} = \frac{\epsilon_{k+q\lambda}+\epsilon_{k'-q\lambda}-\epsilon_{k'\lambda}-\epsilon_{k\lambda}}{\left|\epsilon_{k\lambda}\right| + \left|\epsilon_{k'+q\lambda}\right| + \left|\epsilon_{k'\lambda}\right| + \left|\epsilon_{k'+q\lambda}\right| + \lambda} \tag{4.56}$$

Die Flußgleichung für die Kopplung $V_{kk'q\lambda}$ lautet dann gemäß (4.37)

$$\begin{aligned}\frac{dV_{kk'q\lambda}}{d\lambda} &= -\frac{1}{2} u(x_{kk'q\lambda})(\eta_{k+q,-q\lambda} g^*_{k'-q\lambda} + \eta^*_{k'-q\lambda} g_{k+q,-q\lambda} + \eta_{k'-q,q\lambda} g^*_{kq\lambda} + \eta^*_{kq\lambda} g_{k'-q,q\lambda}) \\ &\quad + r(x_{kk'q\lambda}) \frac{d\ln u(x_{kk'q\lambda})}{d\lambda} V_{kk'q\lambda}\end{aligned} \tag{4.57}$$

Mit

$$V_{kk'q\lambda} = e(x_{kk'q\lambda}) \tilde{V}_{kk'q\lambda} \tag{4.58}$$

erhält man

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}_{kk'q\lambda}}{d\lambda} &= -\frac{1}{2}\exp(-r(x_{kk'q\lambda}))(\eta_{k+q,-q\lambda} g^*_{k',-q\lambda} + \eta^*_{k'-q\lambda} g_{k+q,-q\lambda} + \eta_{k'-q,q\lambda} g^*_{kq\lambda} + \eta^*_{kq\lambda} g_{k'-q,q\lambda}) \\ &= \frac{1}{2}\exp(-r(x_{kk'q\lambda})) \Bigg(\frac{g^*_{k',-q\lambda}}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{dg_{k+q,-q\lambda}}{d\lambda} + \frac{g_{k+q,-q\lambda}}{\epsilon_{k'\lambda}-\epsilon_{k'-q\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{dg^*_{k',-q\lambda}}{d\lambda} \\ &\quad + \frac{g^*_{kq\lambda}}{\epsilon_{k'-q\lambda}-\epsilon_{k'\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{dg_{k'-q,q\lambda}}{d\lambda} + \frac{g_{k'-q,q\lambda}}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}} \frac{dg^*_{kq\lambda}}{d\lambda} \Bigg).\end{aligned} \tag{4.59}$$

Benutzt man das obige Ergebnis für $g_{kq\lambda}$, so ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}_{kk'q\lambda}}{d\lambda} &= \frac{1}{2}\exp(-r(x_{kk'q\lambda}))\,|g_{q\Lambda}|^2 \\ &\quad \Bigg(\frac{e(x_{k'-q\lambda})}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{k+q,-q,\lambda})}{d\lambda}+\frac{e(x_{k+q,-q,\lambda})}{\epsilon_{k'\lambda}-\epsilon_{k'-q\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{k'-q\lambda})}{d\lambda} \\ &\quad +\frac{e(x_{kq\lambda})}{\epsilon_{k'-q\lambda}-\epsilon_{k'\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{k'-q,q\lambda})}{d\lambda}+\frac{e(x_{k'-q,q\lambda})}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{kq\lambda})}{d\lambda}\Bigg). \qquad (4.60)\end{aligned}$$

Spezialfälle

a) $k' = k + q$

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}_{kk'q\lambda}}{d\lambda} &= \frac{1}{2}|g_{q\Lambda}|^2\Bigg(\frac{1}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de^2(x_{k+q,-q,\lambda})}{d\lambda} \\ &\quad +\frac{1}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de^2(x_{k,q,\lambda})}{d\lambda}\Bigg) \qquad (4.61)\end{aligned}$$

Nimmt man wie oben an, daß die λ–Abhängigkeit von $\epsilon_{k\lambda}$ und $\omega_{q\lambda}$ vernachlässigt werden kann, so findet man

$$\begin{aligned}\tilde{V}_{kk'q\lambda} &= |g_{q\Lambda}|^2\Bigg(\frac{\omega_{q\lambda}}{(\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda})^2-\omega_{q\lambda}^2} \\ &\quad -\frac{e^2(x_{k+q,-q,\lambda})}{2(\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda})}-\frac{e^2(x_{k,q,\lambda})}{2(\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda})}\Bigg) \qquad (4.62)\end{aligned}$$

Der erste Term stellt daß bekannte Ergebnis dar. Die Singularität wird durch die anderen beiden Terme behoben. Sie treten auf, weil die Fermion–Boson Wechselwirkung nicht vollständig eliminiert wurde.

b) $k' = -k$ Das ist die Wechselwirkung innerhalb eines Cooperpaares.

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{V}_{k-kq\lambda}}{d\lambda} &= \exp(-r(x_{kk'q\lambda}))\,|g_{q\Lambda}|^2 \\ &\quad \Bigg(\frac{e(x_{kq\lambda})}{\epsilon_{k+q\lambda}-\epsilon_{k\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{k+q,-q,\lambda})}{d\lambda}+\frac{e(x_{k+q,-q,\lambda})}{\epsilon_{k\lambda}-\epsilon_{k+q\lambda}+\omega_{q\lambda}}\frac{de(x_{kq\lambda})}{d\lambda}\Bigg) \\ &= -\exp(-r(x_{kk'q\lambda}))\frac{|g_{q\Lambda}|^2}{(|\epsilon_{k+q\lambda}|+|\epsilon_{k\lambda}|+\omega_{q\lambda}+\lambda)^2} \\ &\quad [e(x_{kq\lambda})e'(x_{k+q,-q,\lambda})+e(x_{k+q,-q,\lambda})e'(x_{kq\lambda})] \qquad (4.63)\end{aligned}$$

Für $\omega_{q\lambda} > |\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda}|$ ist das Vorzeichen beider Terme in der positiv, die Wechselwirkung also attraktiv. Für $\omega_{q\lambda} < |\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda}|$ ist das Vorzeichen beider Terme unterschiedlich. Für nicht zu große $\omega_{q\lambda} > 0$ ist aber der positive Term vom Betrag her immer größer als der negative. Auch in diesem Fall ist die Wechselwirkung attraktiv. (Beweis mittels Mittelwertsätzen, Monotonie von $e(x)$)

Die Kopplung c_q kann entsprechend berechnet werden. Man erhält

$$\frac{dc_q}{d\lambda} = -\frac{1}{2}u(x_{q\lambda})\sum_k n_k(\eta_{kq\lambda}g_{k+q,-q\lambda} + \eta_{k+q,-q\lambda}g_{kq\lambda} + \eta_{k-q\lambda}g_{k-q,q\lambda} + \eta_{k-q,q\lambda}g_{k-q\lambda}) + r(x_{q\lambda})\frac{d\ln u(x_{q\lambda})}{d\lambda}c_q \tag{4.64}$$

mit

$$x_{q\lambda} = \frac{2\omega_{q\lambda}}{2\omega_{q\lambda}+\lambda}. \tag{4.65}$$

Analog zu oben ergibt sich

$$c_q = e(x_{q\lambda})\tilde{c}_q \tag{4.66}$$

und

$$\frac{d\tilde{c}_q}{d\lambda} = -\frac{1}{2}\exp(-r(x_{q\lambda}))\sum_k n_k(\eta_{kq\lambda}g_{k+q,-q\lambda} + \eta_{k+q,-q\lambda}g_{kq\lambda} + \eta_{k-q\lambda}g_{k-q,q\lambda} + \eta_{k-q,q\lambda}g_{k-q\lambda}) \tag{4.67}$$

4.4 Vergleich mit Wegners Flußgleichungen

Störungstheoretische Renormierung, Wegners Flußgleichungen und das hier vorgestellte Renormierungsverfahren arbeiten mit kontinuierlichen unitären Transformationen oder können in dieser Form formuliert werden.

$$\frac{dH_\lambda}{d\lambda} = [\eta_\lambda, H_\lambda] \tag{4.68}$$

Für die Matrixelemente

$$\frac{dH_{ij\lambda}}{d\lambda} = \eta_{ij\lambda}(E_{i\lambda} - E_{j\lambda}) + \sum_{k\neq i,j}(\eta_{ik\lambda}H_{kj\lambda} - H_{ik\lambda}\eta_{kj\lambda}) \tag{4.69}$$

Mit $H_\lambda = H_{0\lambda} + H_{I\lambda}$, $H_{I\lambda} = O(g)$ findet man in beiden Fällen

$$\eta_{ij\lambda} = \frac{1}{E_{i\lambda} - E_{j\lambda}}\frac{dH_{ij\lambda}}{d\lambda} \tag{4.70}$$

Die Wahl von η in führender Ordnung bestimmt das Verhalten von $H_{I\lambda}$ in führender Ordnung oder umgekehrt. Entwickelt man η und $H_{I\lambda}$ nach Potenzen der Kopplungskonstanten, so kann man η in allen Gleichungen durch Ableitungen nach Matrixelementen von $H_{I\lambda}$ ausdrücken. Die Freiheit, die man in der Wahl von η hat, entspricht der Freiheit in der Wahl von $\frac{dH_{ij\lambda}}{d\lambda}$ in führender Ordnung.

Beispiel:

$$\frac{d\omega_{q\lambda}}{d\lambda} = \sum_k \frac{n_k - n_{k+q}}{\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d\,|g_{kq\lambda}|^2}{d\lambda}. \tag{4.71}$$

$$\frac{d\epsilon_{k\lambda}}{d\lambda} = -\sum_q \frac{n_{k+q}}{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d\,|g_{kq\lambda}|^2}{d\lambda} + \sum_q \frac{n_{k+q}+1}{\epsilon_{k+q\lambda} - \epsilon_{k\lambda} + \omega_{q\lambda}}\frac{d\,|g_{k+q,-q\lambda}|^2}{d\lambda} \tag{4.72}$$

jeweils mit Korrekturen $O(g^4)$. Diese Gleichungen sind in allen Verfahren die selben. In allen Verfahren kann $g_{kq\lambda}$ in der Form

$$g_{k,q,\lambda} = g_{k,q,\Lambda} \frac{f_{k,q,\lambda}}{f_{k,q,\Lambda}} + O(g^3) \tag{4.73}$$

geschrieben werden. Der Unterschied besteht in der Form von f. Es gilt

- Störungstheoretische Renormierung:

  $$f_{k,q,\lambda} = \theta(\lambda - \omega_{q,\lambda}) \tag{4.74}$$

  Die Ableitung von f enthält eine Deltafunktion. Diese Wahl von f führt also zu Divergenzen, wenn $\lambda = |\epsilon_{k+q,\lambda} - \epsilon_{k,\lambda}|$. Dieses Problem läßt sich nur begrenzt beheben, wenn man statt der Stufenfunktion eine glatte Funktion zum Abscheiden benutzt.

- Das Verfahren von Glazek und Wilson:

  $$f_{k,q,\lambda} = e\left(\frac{\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}}{|\epsilon_{k\lambda}| + |\epsilon_{k+q\lambda}| + \omega_{q\lambda} + \lambda}\right) \tag{4.75}$$

  mit einer glatten Fuktion $e(x)$, die von 1 auf 0 fällt. Leitet man $f_{k,q,\lambda}$ nach λ ab, so tritt ein Faktor $\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}$ auf, der den entsprechenden Faktor im Nenner in den Gleichungen für $\epsilon_{k\lambda}$ und $\omega_{q\lambda}$ weghebt. Divergenzen aufgrund kleiner Energienenner treten nicht auf. Es ist möglich, den Limes $\lambda \to 0$ durchzuführen. Auch in diesem Limes treten keine Divergenzen auf.

- Wegners Flußgleichungen:

  $$f_{k,q,\lambda} = \exp\left(-\frac{(\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda})^2}{\lambda^2}\right) \tag{4.76}$$

  ($\ell = \lambda^{-2}$, die Form der Gleichung ändert sich dadurch nicht.) Wieder erhält man durch Ableiten einen Faktor $\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{k+q\lambda} + \omega_{q\lambda}$, der den entsprechenden Faktor im Nenner in den Gleichungen für $\epsilon_{k\lambda}$ und $\omega_{q\lambda}$ weghebt. Für endliche λ treten keine Divergenzen auf. Integriert man bis zu einem endlichen λ, so wird der Hamiltonoperator wie im vorangegangenen Fall banddiagonal. Der Unterschied besteht darin, das hier alle Energiedifferenzen gleich behandelt werden, während bei Glazek und Wilson eine relative Gewichtung vorgenommen wird. Integriert man bis $\lambda = 0$, so ergibt sich eine Divergenz in $O(g^2)$. Betrachtet man aber das asymptotische Verhalten, so bemerkt man, daß diese Divergenz verschmiert wird. Das ist ein nicht-störungstheoretischer Effekt, der in einer systematischen Entwicklung nach der Kopplungskonstanten nicht auftritt.

  Ein weiterer Unterschied wird deutlich, wenn man zum Limes $\lambda \to 0$ übergeht. Im Wegnerschen Verfahren wird der Hamiltonoperator diagonalisiert. Das kann im thermodynamischen Limes zu Problemen führen, die damit zusammenhängen, daß der thermodynamische Limes nicht notwendiger mit dem Limes $\lambda \to 0$ vertauscht. Für endliche λ tritt ein entsprechendes Problem nicht auf, ebensowenig im Renormierungsverfahren von Glazek und Wilson. Im Verfahren von Wegner haben wir dieses Problem vermieden, in dem der Hamiltonoperator blockdiagonalisert wurde. Damit ist aber das Renormierungsproblem unter Umständen nicht vollständig behandelt, da innerhalb der Blöcke noch Matrixelemente auftreten können, die große Energiedifferenzen verknüpfen. In den bisher behandelten Modellen trat dieses Problem nicht auf.

Was passiert mit den induzierten Wechselwirkungen? Die den induzierten Wechselwirkungen entsprechenden Koeffizienten in η liefern in der Flußgleichung

$$\frac{dH_{ij\lambda}}{d\lambda} = \eta_{ij\lambda}(E_{i\lambda} - E_{j\lambda}) + \sum_{k\neq i,j} (\eta_{ik\lambda} H_{kj\lambda} - H_{ik\lambda}\eta_{kj\lambda}) \tag{4.77}$$

den ersten Term. Dieser Term kann wieder frei gewählt werden, analog zu den ursprünglichen Kopplungen. Die Inhomogenität kann wie in den Gleichungen für die Diagonalmatrixelemente in $O(g^2)$ durch Ableitungen nach Matrixelementen der Kopplung ausgedrückt werden. In solchen zusätzlichen Wechselwirkungen treten Unterschiede auf, insbesondere dann, wenn es in dem betrachteten System mehrere Energieskalen gibt, oder wenn es mehrere Wechselwirkungen gibt. Zum Beispiel kann man neben einer Wechelwirkung zwischen Fermionen und Bosononen noch Wechselwirkungen zwischen den Fermionen oder zwischen den Bosonen haben. Wegners Flußgleichungen und das Renormierungsverfahren von Glazek und Wilson haben keine Probleme, wenn mehrere Energieskalen auftreten. Im ersten Fall läuft ℓ von 0 bis ∞, im zweiten entsprechend λ von ∞ bis 0. Treten in den Verfahren mehrere große Energieskalen auf (z.B. Bandbreite eine elektronischen Bandes und die Debyefrequenz für Phononen), so werden beide entsprechend behandelt. Im Fall der störungstheoretischen Renormierung ist das schwieriger.

Literaturverzeichnis

[1] Wilson, K.G.: Phys Rev **140** B445 (1965)

[2] Wilson, K.G.: Phys Rev D**2** 1438 (1970)

[3] Wegner, F.: Ann. Physik (Leipzig) **3**, 77 (1994)

[4] Glazek, S.D. und K.G. Wilson: Phys. Rev D**48** 5863 (1993)

[5] Glazek, S.D. und K.G. Wilson: Phys. Rev D**49** 4214 (1994)

[6] Dyson, F.J.: Phys Rev **75** 1736 (1949)

[7] Ward, J.C.: Proc. Phys. Soc. (London) **64**, 54 (1951)

[8] Ward, J.C.: Phys Rev **84** 897 (1951)

[9] Lee, T.D.: Phys Rev **95** 1329 (1954)

[10] Kato, T.:*Perturbation Theory for linear operators.* Springer, New York 1966.

[11] Kehrein, S.K., Mielke, A. and Neu, P.: Z. Phys. B **99** 269 (1996)

[12] Kehrein, S.K. and Mielke, A.: 'Theory of the Anderson impurity model: The Schrieffer–Wolff transformation re–examined.' preprint HD-TVP-95-14, ESI-prepint 270, condmat/9510145 (1995)

[13] Kehrein, S.K. and Mielke, A.: 'On the spin–boson model with a sub–Ohmic bath.' preprint HD-TVP-96-2, cond-mat/9602022 (1996)

[14] Lenz, P. and Wegner, F.: 'Flow equations for the electron–phonon interaction.' preprint (1996)

[15] Wilson, K.G. et al: Phys. Rev D**49** 6720 (1994)

[16] Bach, V., J. Fröhlich and I.M. Sigal: Lett. Math. Phys. **34** 183 (1995)