

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

<http://www.tphys.uni-heidelberg.de/mielke/>  
e-mail: [mielke@tphys.uni-heidelberg.de](mailto:mielke@tphys.uni-heidelberg.de)

# Dissipative Quantensysteme

**Andreas Mielke**

Sommersemester 2005  
Zeit: Donnerstag, 9-11  
Ort: Philosophenweg 19, Seminarraum

Dieses Script wird fortlaufend ergänzt.

*Copyright ©2002ff Andreas Mielke*

## **Abstract**

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

## **Hinweise zu diesem Text**

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

Das Manuscript wird fortlaufend erweitert und ergänzt.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Einführung in dissipative Systeme</b>	<b>4</b>
2.1	Als Vorübung: Klassische Systeme . . . . .	4
2.2	Der dissipative harmonische Oszillator . . . . .	5
2.3	Rauschen in der Quantenmechanik . . . . .	9
2.4	Der harmonische Oszillator . . . . .	10
2.5	Das quantenmechanische Zwei-Zustands-System . . . . .	12
2.6	Ein Nukleon in einer Pionenwolke . . . . .	13
2.7	Fermionische Bäder . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Das Spin-Boson-Modell</b>	<b>14</b>
3.1	Der Fall $\Delta = 0$ . . . . .	14
3.2	Endliche $\Delta$ . . . . .	15
3.3	Adiabatische Renormierung . . . . .	16
3.3.1	Das Ohmsche Bad . . . . .	18
3.3.2	Das super-Ohmsche Bad . . . . .	18
3.3.3	Das sub-Ohmsche Bad . . . . .	19
3.4	Flußgleichungen . . . . .	19
3.4.1	Bemerkungen zur Methode . . . . .	20
3.4.2	Transformation des Hamiltonoperators . . . . .	21
3.4.3	Lösung der Gleichungen . . . . .	23
3.4.4	Transformation der Observablen . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Kompliziertere dissipative Quantensysteme</b>	<b>30</b>
4.1	Gekoppelte Tunnelsysteme . . . . .	30
4.2	Geringe Störstellendichte . . . . .	35
4.3	Höhere Störstellendichte . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Das Polaron</b>	<b>37</b>
5.1	Einführung . . . . .	37
5.2	Störungstheorie . . . . .	40
5.3	Variationsansatz . . . . .	41
5.4	Starke Kopplung . . . . .	43
5.5	Effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung . . . . .	44
5.5.1	Störungsrechnung . . . . .	44
5.5.2	Flußgleichungen . . . . .	45
5.5.3	Der BCS-Ansatz . . . . .	47
5.5.4	Anregungen . . . . .	50
5.5.5	Berechnung der Sprungtemperatur . . . . .	51

## 1 Einleitung

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

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

## 2 Einführung in dissipative Systeme

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

### 2.1 Als Vorübung: Klassische Systeme

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

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

$H_S$  beschreibt dabei das System,  $H_B$  die Umgebung (Wärmebad) und  $H_{SB}$  die Kopplung zwischen System und Umgebung. In einem solchen Modell besteht schon konzeptionell eine Asymmetrie: Man interessiert sich letztlich nur für die Bewegung des Systems; für das System sind auch Informationen vorhanden und es ist eventuell experimentell zugänglich. Physikalische Details des Wärmebades und auch der Kopplung des Systems an das Wärmebad sind dagegen unbekannt. In der Regel beschreibt man das System zum Beispiel durch zeitabhängige Korrelationsfunktionen, wobei über die Freiheitsgrade des Bades gemittelt wird. Die Erwartung ist,

daß die Resultate von den Details des Bades unabhängig sind. Diese Vorstellung entspricht dem, was man von einem Wärmebad in der statistischen Physik immer annimmt: Wenige globale Eigenschaften wie Temperatur oder chemisches Potential sollten ausreichen, um das Bad zu charakterisieren. Wenn dem so ist, dann liegt es nahe, das Bad durch harmonische Oszillatoren zu beschreiben. Ein einfaches Modell für ein Teilchen in einem Potential, das in Wechselwirkung mit einem Wärmebad steht, kann durch die Hamiltonfunktion

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

beschrieben werden. Die Bewegungsgleichungen sind die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

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

Man erhält

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

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

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

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

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

## 2.2 Der dissipative harmonische Oszillator

Die Hamiltonfunktion für dieses einfache Modell ist

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

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

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

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

und ihren komplex Konjugierten zu rechnen. Es gilt

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

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

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

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

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

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

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

Die erste Gleichung kann direkt integriert werden.

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

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

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

Der erste Term in dieser Gleichung ist die ursprüngliche Oszillation des harmonischen Oszillators. Der zweite Term ist eine effektive Rückkopplung: Die Bewegung des Systems hängt offenbar von seiner Vergangenheit ab. Wir werden gleich eine plausible Annahme machen, die dazu führt, daß diese Rückkopplung nicht auftritt, der zweite Term beschreibt dann nur noch

die Reibung oder die Dissipation. Der dritte Term hängt von den Anfangsbedingungen der Badoszillatoren ab. Er besteht aus einer Summe vieler kleiner Terme, über die wir nichts genaues wissen. Dieser Term wird die Rolle einer stochastischen Kraft spielen.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Daraus ergibt sich

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

mit

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

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

und

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

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

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

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

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

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

Wegen des Gleichverteilungssatzes gilt

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

und man erhält

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

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

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

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

Ein zeitlich unkorreliertes Rauschen nennt man weiß. Man erhält es für den Fall, daß  $G(\omega)/\omega$  (und äquivalent  $g_i^2/\omega_i$ ) konstant ist. Da  $R(0)$  endlich sein muß, kann das nicht wirklich gelten. Man benötigt immer einen Ultraviolett-Cutoff  $\omega_c$ . Im Limes  $\omega_c \rightarrow \infty$  erhält man ein weißes

Rauschen. Typischerweise wird man aber eine schwache Abhängigkeit von  $\omega_i$  haben und damit statt der  $\delta$ -Funktion eine abfallende Funktion mit einer Korrelationszeit  $\tau$  erhalten.

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

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

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

### 2.3 Rauschen in der Quantenmechanik

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

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

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

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

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

Diese Bedingungen müssen zudem für alle Zeiten und für alle zulässigen Anfangsbedingungen der Bewegungsgleichung für  $\rho_S$  erfüllt sein.

Um eine Bewegungsgleichung für  $\rho_S$  herzuleiten oder um, weniger ambitioniert, Bewegungsgleichungen für einfache Observable (Ort, Impuls) herzuleiten, kann man wie im klassischen Fall zu Beginn der Vorlesung die Umgebung durch harmonische Oszillatoren modellieren. Dies

ist in vielen Fällen ausreichend. Der Hamiltonoperator, der das System und die Umgebung beschreibt, ist dann von der Form

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

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

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

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

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

## 2.4 Der harmonische Oszillator

Es gilt

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

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

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

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

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

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

schreiben. Als Bewegungsgleichungen erhält man

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

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

Die Bewegungsgleichung für  $a_k$  kann formal integriert werden

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

und man erhält

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

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

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

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

mit

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

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

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

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

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

Dazu muß natürlich

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

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

2. Der zweite Term im Nenner entspricht einer Dämpfung. Es treten keine Pole bei  $\omega = \pm\Omega_{\text{ren}}$  auf, sondern Maxima.

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

## 2.5 Das quantenmechanische Zwei-Zustands-System

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

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

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

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

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

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

Das Modell ist im allgemeinen nicht exakt lösbar, man kennt aber einige exakte Resultate für dieses Modell. Das Langzeitverhalten der dynamischen Korrelationsfunktionen ist für  $T = 0$  oder für endliche Temperaturen ähnlich wie beim dissipativen harmonischen Oszillator. Häufig betrachtet man aber andere Eigenschaften. Beispielsweise wird das System in einen festen Anfangszustand gesetzt, und man interessiert sich für die dynamische Entwicklung des Systems

aus diesem Zustand. Für solche Korrelationsfunktionen erhält man, im Gegensatz zu den Gleichgewichtskorrelationsfunktionen, meist einen exponentiellen Zerfall: Kerne zerfallen nach einem Exponentialgesetz, Atome in angeregten Zuständen fallen in tieferliegende Zustände nach einem Exponentialgesetz, usw.

Unabhängig davon, ob die Wechselwirkung stark oder schwach ist, kommt es zu starken Renormierungseffekten: Das effektive Tunnelmatrixelement  $\Delta_{\text{eff}}$  ist deutlich kleiner als  $\Delta$ . Dieser Effekt ist störungstheoretisch nicht zugänglich.

## 2.6 Ein Nukleon in einer Pionenwolke

Ein anderes einfaches dissipatives Zweiniveau-System wird durch den Hamiltonoperator

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

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

## 2.7 Fermionische Bäder

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

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

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

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

Der Hamiltonoperator ist also von der Gestalt eines typischen System-Bad Modells, wobei der reine Systemanteil verschwindet, die System-Bad Wechselwirkung durch die (meist antiferromagnetische,  $J < 0$ ) Spin-Spin Wechselwirkung gegeben ist und das Bad aus Bandlektronen

besteht. Kondo hat gezeigt, daß die störungstheoretische Behandlung dieses Modells zusammenbricht. Unterhalb der Kondotemperatur

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

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

### 3 Das Spin-Boson-Modell

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

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

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

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

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

#### 3.1 Der Fall $\Delta = 0$

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

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

hat die Eigenschaften

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

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

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

und damit gilt

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

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

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

Der Hamiltonoperator wird so also diagonalisiert, die Grundzustandsenergie ist

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

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

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

eingeführen. Damit gilt

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

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

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

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

### 3.2 Endliche $\Delta$

Für endliche  $\Delta$  kann man zunächst die gleiche Transformation durchführen.

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

Um den ersten Term berechnen zu können, schreiben wir

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.3 Adiabatische Renormierung

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

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

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

und transformieren  $H$  mit dieser Transformation. Das liefert

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

Im nächsten Schritt wird dann eine zweite Transformation

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

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

Die Auswertung erfolgt ähnlich wie im vorangegangenen Abschnitt. Es gilt

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

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

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

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

und damit

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

und analog

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

Man erhält also in dieser Näherung

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

mit

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

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

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

und nach  $n$  Schritten

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

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

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

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

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

### 3.3.1 Das Ohmsche Bad

Mit

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

ergibt sich

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

und damit

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

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

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

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

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

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

Der Parameter  $a$ , der eingeführt wurde, spielt für das qualitative Resultat keine Rolle, er beeinflusst lediglich die Größe von  $\Delta_\infty$ .

### 3.3.2 Das super-Ohmsche Bad

In diesem Fall ist

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

mit  $s > 1$ . Damit gilt

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

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

### 3.3.3 Das sub-Ohmsche Bad

In diesem Fall ist

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

mit  $s < 1$ . Damit gilt

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

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

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

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

## 3.4 Flußgleichungen

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3.4.1 Bemerkungen zur Methode

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

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

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

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

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

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

mit

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

Dann gilt

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

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

Es gilt

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

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

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

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

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

### 3.4.2 Transformation des Hamiltonoperators

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

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

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

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

so erhält man eine Erzeugende der Form

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Aus dem Kommutator ergeben sich die folgenden Flußgleichungen für die Parameter

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

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

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

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

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

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

Damit gilt

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

und

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

Mit

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

wobei  $f_k > 0$  gelten soll, erhält man

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

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

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

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

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

### 3.4.3 Lösung der Gleichungen

Wie oben setzen wir

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

und  $f_k = 1$ . Damit gilt

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

und

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

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

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

Untersuchen wir zunächst die Asymptotik der Gleichungen. Ich setze dazu

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

und werte das Integral über  $\omega$  in der Sattelpunktsnäherung aus. Das Maximum des Integranden bestimmt man aus

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

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

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

und als Näherung für große  $\ell$

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

Es liegt nahe, für das asymptotische Verhalten einen Ansatz

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

zu machen. Wir machen folgende Fallunterscheidung:

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

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

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

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

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

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

wobei

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

Damit findet man

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

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

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

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

Damit erhält man

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

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

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

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

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

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

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

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

und damit

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

Das ist konsistent mit der Annahme falls

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

Als einzige konsistente Lösung erhalten wir also

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

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

Eine einfache, selbstkonsistente Gleichung zur Bestimmung von  $\Delta_\infty$  erhält man, wenn man in der Flußgleichung

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

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

auf der rechten Seite  $\Delta$  durch  $\Delta_\infty$  ersetzt und die Integration über  $\ell$  ausführt. Man erhält dann

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Diese Gleichung liefert für

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

eine Lösung mit

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

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

### 3.4.4 Transformation der Observablen

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

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

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

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

Damit erhält man

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

In der Heisenbergdarstellung gilt

$$\begin{aligned} \sigma_z(\infty, t) &= \exp(iH(\infty)t) \sigma_z(\infty) \exp(-iH(\infty)t) \\ &= h(\infty) \exp(i\Delta(\infty)t) \sigma_z + \sigma_x \sum_k \chi_k(\infty) (b_k \exp(-i\omega_k t) + b_k^\dagger \exp(i\omega_k t)) \end{aligned} \quad (183)$$

Berechnet man die Korrelationsfunktion

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

so erhält man

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

mit

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

Aufgrund der Erhaltungsgröße gilt

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

Setzt man  $\eta_{ky}$  in die Flußgleichungen ein, so erhält man

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

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

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

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

gilt

$$\chi_k(\ell) = \lambda_k(0) \int_0^\ell d\ell' h f(\tilde{\omega}_k, \ell') \quad (192)$$

Damit findet man

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

Nehmen wir an, daß  $\Delta_\infty > 0$ . Dann ist das Integral in der Klammer für  $\omega$  in der Nähe von  $\Delta_\infty$  proportional zu  $(\omega - \Delta_\infty)^{-1}$  und wir erhalten einen Widerspruch zu der Summenregel. Also muß  $h(\ell) \rightarrow_{\ell \rightarrow \infty} 0$  gelten. Damit erhält man sofort, daß das Verhalten von  $C(\omega)$  für kleine  $\omega$  durch  $C(\omega) \propto J(\omega, 0) \propto \omega^s$  gegeben ist. Damit erhält man

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

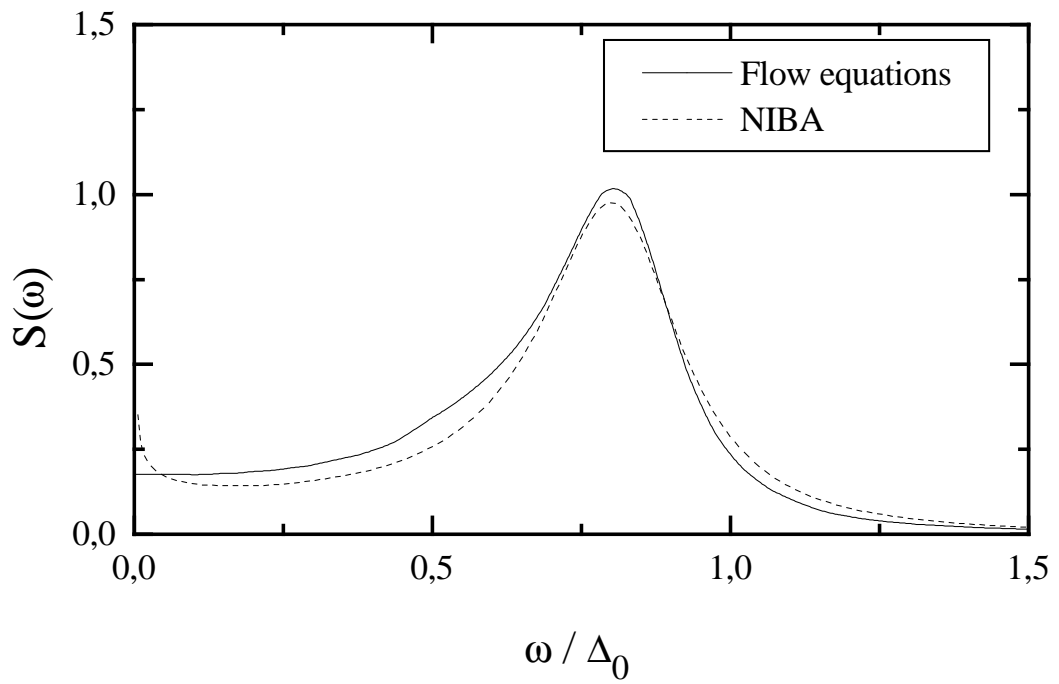
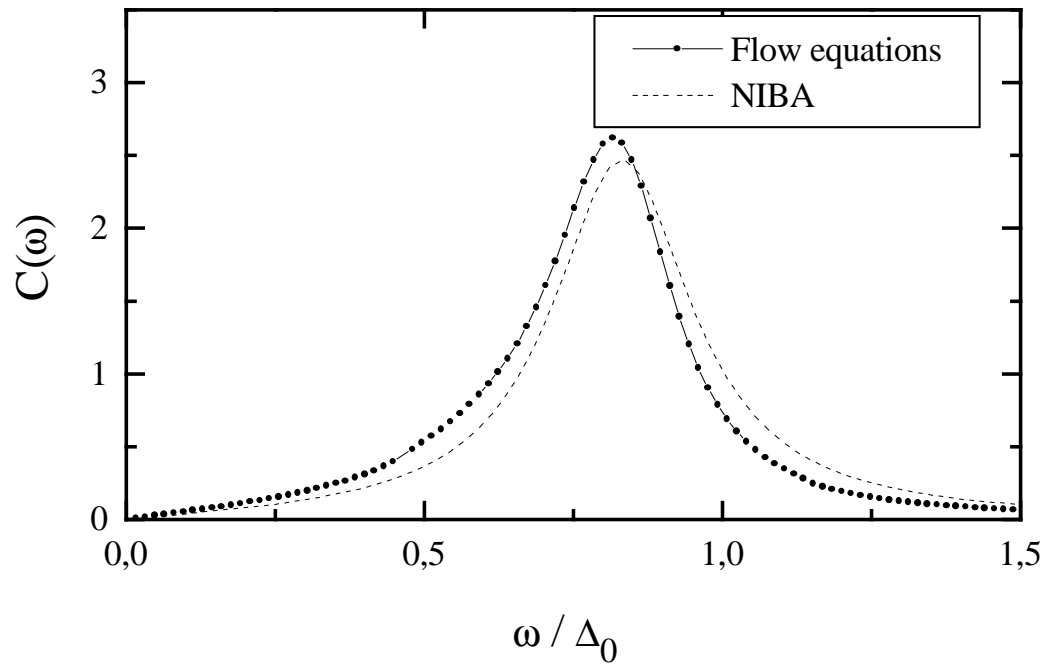
## 4 Kompliziertere dissipative Quantensysteme

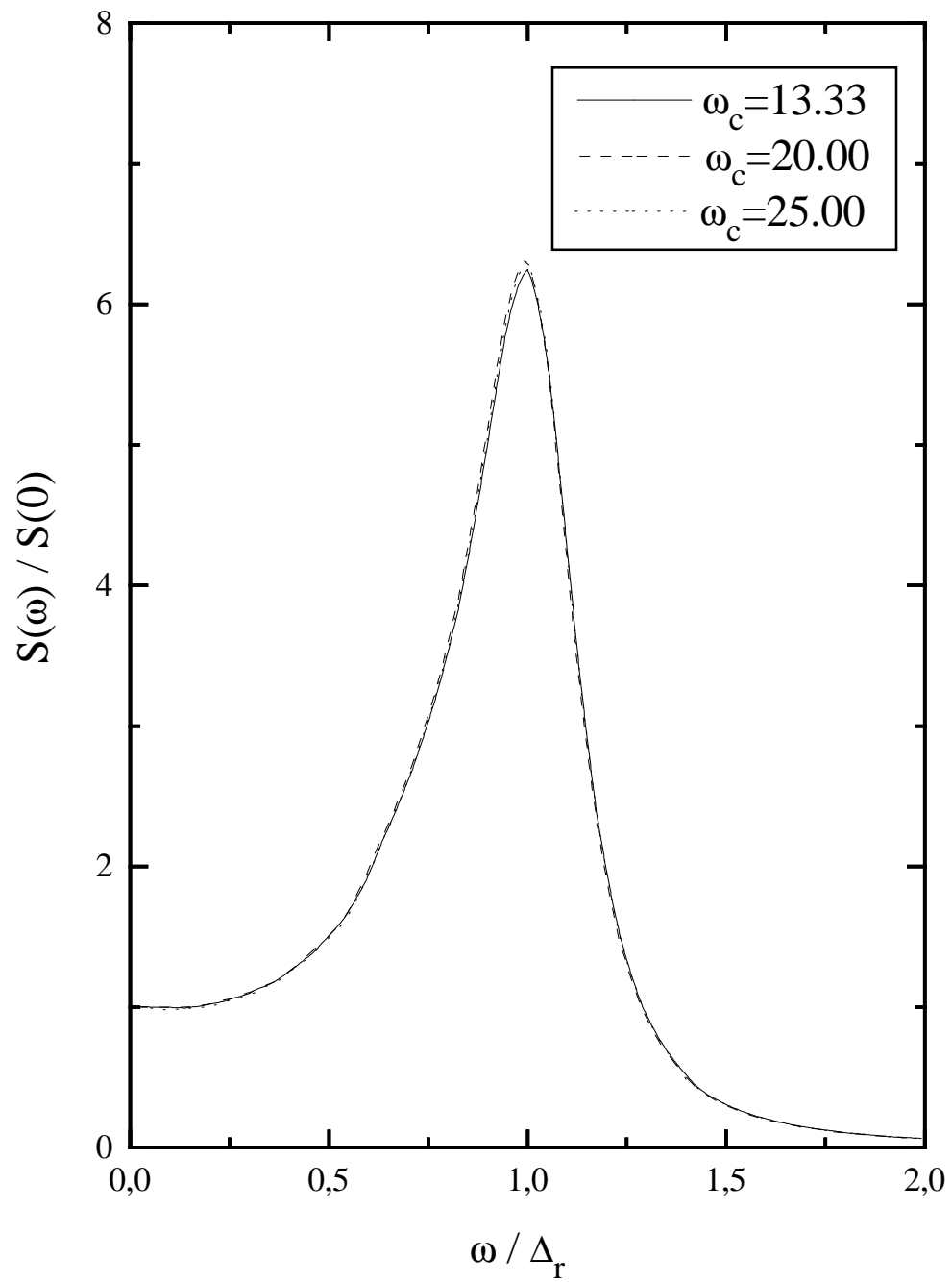
### 4.1 Gekoppelte Tunnelsysteme

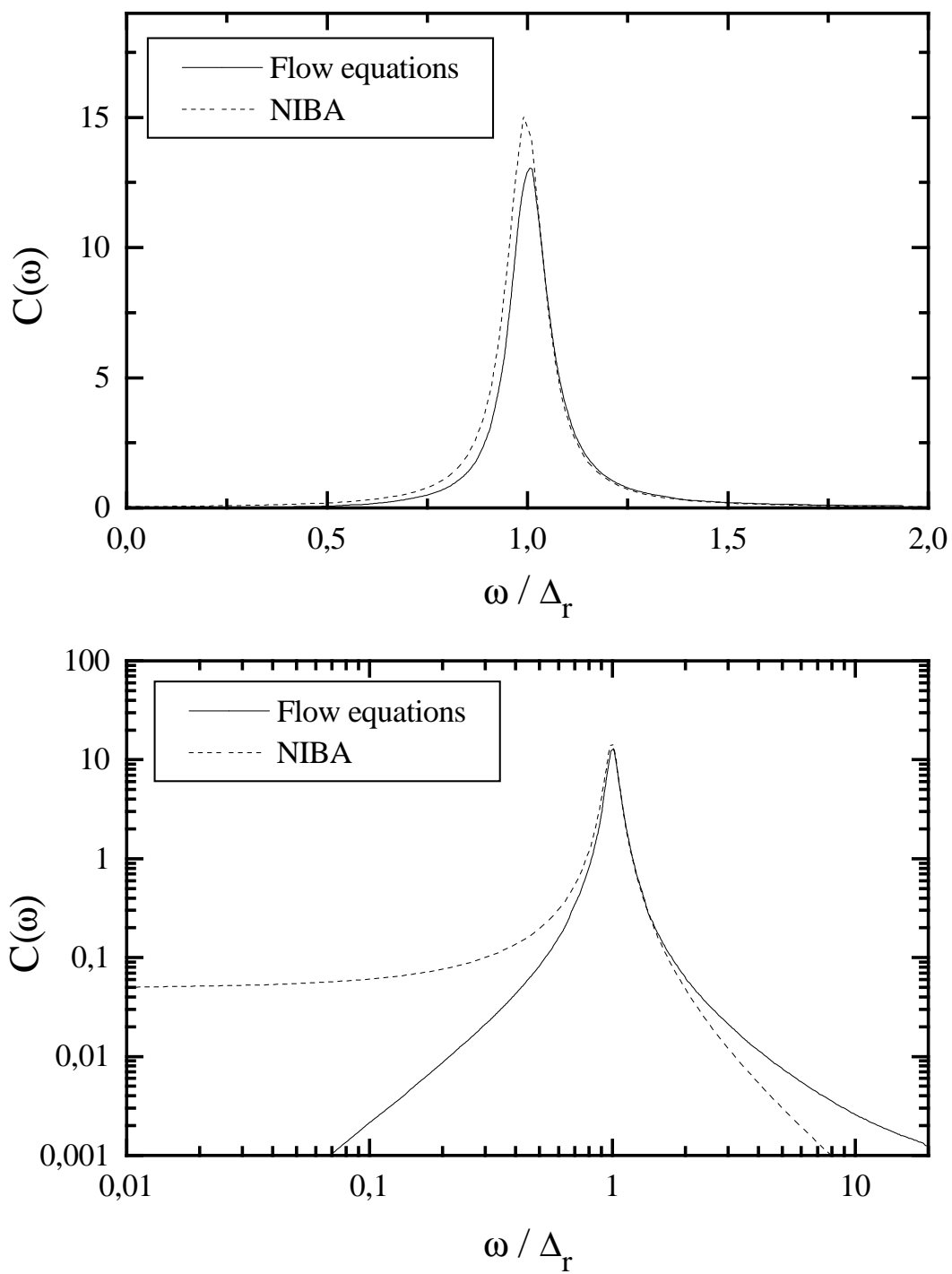
In einem Festkörper mit einer endlichen Dichte von Störstellen kommt es im Vergleich zu einer Störstelle zu neuen Effekten. Zur Beschreibung dieser Effekte verwenden wir wie oben für eine Störstelle (Abschnitt 3) ein stark vereinfachtes Modell. Jede Störstelle wird als Tunnelsystem modelliert, wobei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

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

Die Wechselwirkung  $J_{i,j}$  verschwindet anfänglich und wird durch die Elimination der Kopplung an die Bosonen erzeugt. Der Index  $i$  nummeriert die Störstellen durch, jede Störstelle koppelt an die bosonischen Freiheitsgrade (e.g. Phononen). Im Unterschied zu dem einfachen Zwei-Niveau-System müssen wir jetzt komplexe  $\lambda_{k,i}$  zulassen. Typischerweise wird die Phase vom Ort der Störstelle abhängen ( $\propto \exp(\pm i k R_i)$ ). Diese Abhängigkeit kann auch nicht mehr durch







eine Eichtransformation eliminiert werden. Nach den Erfahrungen für ein Zwei-Niveau-System behandeln wir diesen Hamiltonoperator mit Flußgleichungen. Die Erzeugende ist

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Analog zu früher wählen wir

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

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

Ferner nehmen wir der Einfachheit halber an, daß

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

Damit ist  $\Delta_i$  von  $i$  unabhängig und man erhält für  $\Delta_i$  und für  $|\lambda_{k,i}|$  die selben Gleichungen wie vorher. Neu ist lediglich die Wechselwirkung  $J_{i,j}$ , in die auch die Phase der  $\lambda_{k,i}$  eingeht. Diese Phase ist aber nicht  $\ell$ -abhängig. Setzt man in der Gleichung für  $J_{i,j}$  die Ausdrücke für  $\eta$  und  $\lambda$  ein und ersetzt man anschließend  $\Delta$  durch  $\Delta_\infty$ , dann lassen sich die Integrale berechnen und man erhält

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

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

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

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

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

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

## 4.2 Geringe Störstellendichte

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

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

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

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

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

schreiben. Der Unterschied zu (211) besteht darin, daß der Hamiltonoperator nun in disjunkte Paare zerfällt und wir nur noch den Hamiltonoperator für ein Paar lösen müssen. Wir betrachten

im folgenden den einfachen Fall, wo alle  $\Delta_{\infty,i}$  gleich sind und bezeichnen diesen Parameter mit  $\Delta$ . Für ein Paar ist  $H$  ein  $4 \times 4$ -Matrix von der Form

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

Die orthogonale Transformation

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

führt auf

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

mit dem Spektrum

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

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

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

mit

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

wobei

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

Mit dieser Darstellung von  $\rho$  lassen sich thermodynamische Erwartungswerte berechnen. Für die Energie erhält man

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

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

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

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

### 4.3 Höhere Störstellendichte

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

## 5 Das Polaron

### 5.1 Einführung

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

Der Hamiltonoperator für dieses Problem hat die Form

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

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

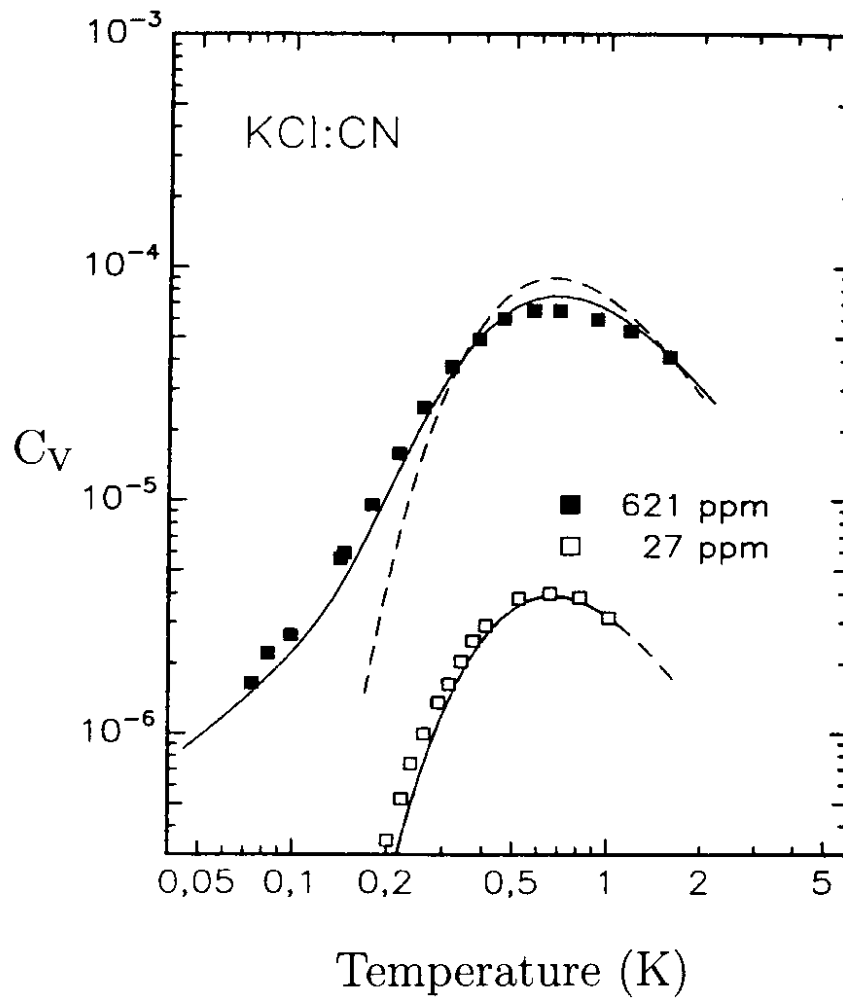


Abbildung 4.3 aus [12]. Gezeigt sind experimentelle Ergebnisse für die spezifische Wärme und die zugehörigen Theoriekurven.

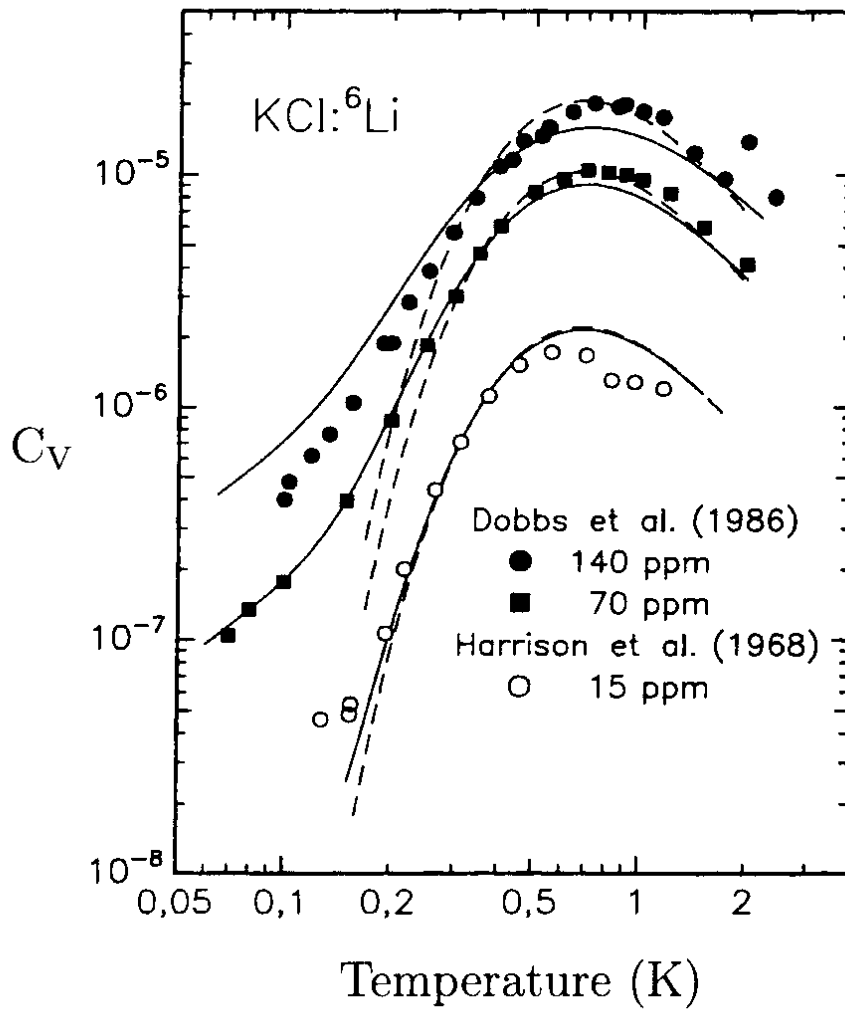


Abbildung 4.4 aus [12].

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

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

## 5.2 Störungstheorie

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

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

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

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

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

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

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

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

Dieses Integral kann analytisch berechnet werden, man findet

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

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

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

Physikalisch erhält man also eine effektive Masse

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

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

Numerische Werte von  $\alpha$  sind für einige Substanzen in der folgenden Tabelle zusammengestellt:<sup>1</sup>

Substanz	$\alpha$
InSb	0,015
CdS	0,65
AgCl	1,90
KBr	3,07
KCl	3,46

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

### 5.3 Variationsansatz

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

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

eine Erhaltungsgröße ist. Wir führen zunächst die unitäre Transformation

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

durch. Es gilt

$$\begin{aligned} S^{-1}PS &= Q + p \\ S^{-1}pS &= Q - \sum_k k b_k^\dagger b_k + p \\ S^{-1}b_k S &= b_k \exp(-ikr) \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator lautet damit

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

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

<sup>1</sup>nach [14] und J.W. Hodby, J. Phys. C4, L8 (1971).

Der Variationsansatz, den wir verwenden wollen, lautet

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

Es gilt

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

Damit erhält man für den Erwartungswert

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

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

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

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

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

Damit erhält man

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

Eingesetzt in die Definition von  $\eta$  ergibt sich

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

Für die Energie erhält man

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

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

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

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

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

und für  $E$  ergibt sich

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

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

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

Der Zustand  $\Psi$  kann in der Form

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

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

## 5.4 Starke Kopplung

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

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

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

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

## 5.5 Effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung

Der Hamiltonoperator für Elektronen und Phonon in einem Festkörper lautet

$$H = H_{\text{el}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{el-ph}} \quad (213)$$

mit

$$H_{\text{ph}} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} \quad (214)$$

$$H_{\text{el}} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} \quad (215)$$

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} M_{\vec{k}, \vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^{\dagger}) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} \quad (216)$$

Im Elektronenteil haben wir die explizite Elektron-Elektron Wechselwirkung nicht berücksichtigt. Sie kann gegebenenfalls hinzugefügt werden.

### 5.5.1 Störungsrechnung

$$H = H_0 + H' \quad (217)$$

$$\exp(S) H \exp(-S) = H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots \quad (218)$$

$S$  soll von Ordnung  $H'$  sein.

$$\exp(S) H \exp(-S) = H_0 + H' + [S, H_0] + [S, H'] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] + O(H'^3) \quad (219)$$

Man kann  $S$  so wählen, daß die Terme erster Ordnung wegfallen,

$$[S, H_0] = -H' \quad (220)$$

und erhält dann

$$\exp(S) H \exp(-S) = H_0 + \frac{1}{2} [S, H'] \quad (221)$$

Die rechte Seite liefert einen neuen, effektiven Hamiltonoperator. Man kann leicht überlegen, daß dieses Verfahren equivalent zu einer Störungsrechnung in  $H'$  ist.

Für den Fall der Elektron-Phonon Kopplung ist  $H' = H_{\text{el-ph}}$  und wir machen für  $S$  den Ansatz

$$S = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} (S_{\vec{k}, \vec{q}} b_{\vec{q}} + S_{\vec{k}, \vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}}^{\dagger}) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} \quad (222)$$

Wegen

$$[c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma}, H_0] = (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} \quad (223)$$

$$[b_{\vec{q}}, H_0] = \hbar\omega_{\vec{q}}b_{\vec{q}}, \quad [b_{-\vec{q}}^\dagger, H_0] = \hbar\omega_{\vec{q}}b_{-\vec{q}}^\dagger \quad (224)$$

gilt

$$[S, H_0] = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} (S_{\vec{k}, \vec{q}}(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega_{\vec{q}})b_{\vec{q}} + S_{\vec{k}, \vec{q}}^+(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}})b_{-\vec{q}}^\dagger)c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} \quad (225)$$

und durch Koeffizientvergleich ergibt sich

$$\begin{aligned} S_{\vec{k}, \vec{q}} &= \frac{M_{\vec{k}, \vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \\ S_{\vec{k}, \vec{q}}^+ &= \frac{M_{\vec{k}, \vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}}} \end{aligned} \quad (226)$$

Der Kommutator  $[S, H_{\text{el-ph}}]$  enthält Terme mit zwei bosonischen Operatoren und Terme ohne bosonische Operatoren. Die Terme mit zwei bosonischen Operatoren lassen wir aus Konsistenzgründen weg. Entsprechende Terme würden auch im ursprünglichen Hamiltonoperator auftreten, wenn man höhere Beiträge in den Auslenkungen der Atomrümpfe aus den Gleichgewichtslagen mitgenommen hätte. Die Terme ohne bosonische Operatoren lassen sich leicht berechnen, man erhält

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} \\ &+ \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma'} M_{\vec{k}, \vec{q}} M_{\vec{k}', \vec{q}} \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2 - (\hbar\omega_{\vec{q}})^2} c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}', \sigma'} c_{\vec{k}, \sigma} \\ &+ \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} \end{aligned} \quad (227)$$

Die neue, effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung ist in einigen Bereichen attraktiv. Allerdings hat dieser Ausdruck ein paar Nachteile (insbesondere ein divergenter Ausdruck für die Wechselwirkung), bedingt dadurch, daß er aus einer Störungsrechnung stammt.

### 5.5.2 Flußgleichungen

$$\frac{dH}{d\ell} = [\eta, H] \quad (228)$$

$$\eta = [H_d, H] \quad (229)$$

Für die Elektron-Phonon Kopplung. Sei dazu

$$\eta = [H_0, H_{\text{el-ph}}] \quad (230)$$

Man findet

$$\eta = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} (\eta_{\vec{k}, \vec{q}} b_{\vec{q}} + \eta_{\vec{k}, \vec{q}}^+ b_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} \quad (231)$$

mit

$$\eta_{\vec{k},\vec{q}}^- = M_{\vec{k},\vec{q}}^-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- - \hbar\omega_{\vec{q}}) \quad (232)$$

$$\eta_{\vec{k},\vec{q}}^+ = M_{\vec{k},\vec{q}}^-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- + \hbar\omega_{\vec{q}}) \quad (233)$$

Damit  $\eta$  antiheritesch ist, muß  $\eta_{\vec{k},\vec{q}}^+ = -\eta_{\vec{k}+\vec{q},-\vec{q}}^*$  gelten. Berechnet man den Kommutator von  $\eta$  mit  $H$ , so treten unterschiedliche Terme auf. Ein einfacher Beitrag ist

$$[\eta, H_0] = - \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma} (M_{\vec{k},\vec{q}}^-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- - \hbar\omega_{\vec{q}})^2 b_{\vec{q}} + M_{\vec{k},\vec{q}}^-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- + \hbar\omega_{\vec{q}})^2 b_{-\vec{q}}^\dagger) c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \quad (234)$$

Diese Terme liefern Beiträge zu Ableitung von  $M_{\vec{k},\vec{q}}^-$ . Man erkennt, daß man unterschiedliche Beiträge zu den Koeffizienten vor  $b_{\vec{q}}$  und  $b_{-\vec{q}}^\dagger$  erhält. Ich führe deshalb für die entsprechenden Koeffizienten die Bezeichnungen  $M_{\vec{k},\vec{q}}^-$  und  $M_{\vec{k},\vec{q}}^+$  ein. Wegen der Hermitizität von  $H$  gilt  $M_{\vec{k},\vec{q}}^+ = M_{\vec{k}+\vec{q},-\vec{q}}^*$ . Ein Koeffizientenvergleich mit den Termen in der Ableitung des Hamiltonoperators ergibt damit die Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{dM_{\vec{k},\vec{q}}^-}{d\ell} &= -(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- - \hbar\omega_{\vec{q}})^2 M_{\vec{k},\vec{q}}^- \\ \frac{dM_{\vec{k},\vec{q}}^+}{d\ell} &= -(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}}^- + \hbar\omega_{\vec{q}})^2 M_{\vec{k},\vec{q}}^- \end{aligned} \quad (235)$$

Daneben hat man Beiträge vom Kommutator von  $\eta$  mit  $H_{\text{el-ph}}$ .

$$\begin{aligned} [\eta, H_{\text{el-ph}}] &= \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'} (M_{\vec{k},\vec{q}}^- M_{\vec{k}'-\vec{q},\vec{q}}^* (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}'}^- + \hbar\omega_{\vec{q}}) - M_{\vec{k}+\vec{q},-\vec{q}}^* M_{\vec{k}',-\vec{q}}^- (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}'}^- - \hbar\omega_{\vec{q}})) \\ &\quad c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} c_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma'} + \text{Beiträge mit zwei bosonischen Operatoren} \end{aligned} \quad (236)$$

Analog zu der Diskussion von  $[S, H]$  berücksichtigen wir nur die Beiträge, die nicht zwei bosonische Operatoren enthalten. Führt man im Hamiltonoperator eine entsprechende Wechselwirkung

$$\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'} V_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} c_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}',\sigma'} \quad (237)$$

ein, so erhält man als Differentialgleichung durch Koeffizientenvergleich

$$\frac{dV_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}}}{d\ell} = M_{\vec{k},\vec{q}}^- M_{\vec{k}'-\vec{q},\vec{q}}^* (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}'}^- + \hbar\omega_{\vec{q}}) - M_{\vec{k}+\vec{q},-\vec{q}}^* M_{\vec{k}',-\vec{q}}^- (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}}^- - \epsilon_{\vec{k}'}^- - \hbar\omega_{\vec{q}}) \quad (238)$$

Im Prinzip müsste man in den vernachlässigten Termen die Wechselwirkungen wie in der Hartree-Fock Rechnung auf einem effektiven Einteilchenniveau mitnehmen. Das würde zusätzlich zu Beiträgen zu den Ableitungen von den Einteilchenenergien  $\epsilon_{\vec{k}}^-$  und  $\hbar\omega_{\vec{q}}$  führen. Diese Beiträge sind  $O(M^2)$ . Wir sind hier an der effektiven Wechselwirkung interessiert, die selber schon von

dieser Ordnung ist. Würde man entsprechende Korrekturen in den Einteilchenenergien berücksichtigen, so ergäbe dies Korrekturterme zur Wechselwirkung in  $O(M^4)$ . Wir vernachlässigen diese Beiträge. Dann sind die Gleichungen für  $M_{\vec{k},\vec{q}}$  leicht zu lösen:

$$M_{\vec{k},\vec{q}} = M_{\vec{k},\vec{q}}(0) \exp(-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}})^2 \ell) \quad (239)$$

Diesen Ausdruck setzen wir in die Differentialgleichung für  $V_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}}$  ein und integrieren:

$$V_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}}(\ell = \infty) = \left| M_{\vec{k},\vec{q}}(0) \right|^2 \left( \frac{\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} - \hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}})^2 + (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} - \hbar\omega_{\vec{q}})^2} - \frac{\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} + \hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}})^2 + (\epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'} + \hbar\omega_{\vec{q}})^2} \right) \quad (240)$$

Die Nenner in diesem Ausdruck sind Summen von zwei Quadraten, die nur dann verschwinden, wenn beide Quadrate verschwinden. Das Verhalten dieser Ausdrücke ist wesentlich gutartiger als im Fall der Störungsrechnung.

Wir kommen im Verlauf diesen Abschnitts noch einmal auf die Unterschiede in beiden Ausdrücken zurück. Wir bemerken jedoch noch folgendes: Betrachte man speziell die Wechselwirkung zwischen Elektronen mit  $\vec{k}' = -\vec{k}$ , so gilt im ersten Ansatz

$$V_{\vec{k},-\vec{k},\vec{q}}(\ell = \infty) = - \left| M_{\vec{k},\vec{q}}(0) \right|^2 \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{(\hbar\omega_{\vec{q}})^2 - (\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2} \quad (241)$$

während man jetzt

$$V_{\vec{k},-\vec{k},\vec{q}}(\ell = \infty) = - \left| M_{\vec{k},\vec{q}}(0) \right|^2 \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{(\hbar\omega_{\vec{q}})^2 + (\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2} \quad (242)$$

hat. In beiden Fällen hat diese Wechselwirkung einen attraktiven Anteil. Im ersten Fall beschränkt sich dieser Anteil jedoch auf einen kleinen Bereich um die Fermikante, während im zweiten Fall die gesamte Wechselwirkung attraktiv ist.

Obwohl das eigentlich nicht direkt zum Thema der Vorlesung gehört, möchte ich kurz diskutieren, wie man mit Hilfe dieser effektiven Wechselwirkung kritische Temperaturen von Supraleitern berechnen kann.

### 5.5.3 Der BCS-Ansatz

Als vereinfachten Ausgangspunkt betrachten wir zunächst einen einfacheren Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} (c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{\vec{k},\uparrow} + c_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k},\downarrow}) - \frac{U}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}',\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} \quad (243)$$

Es ist nützlich, die Notation etwas zu vereinfachen. Ich notiere im folgenden mit  $k$  den Index  $\vec{k}$ ,  $\uparrow$  und mit  $-k$  den Index  $-\vec{k}$ ,  $\downarrow$ . Der BCS-Ansatz (nach Bardeen, Cooper und Schrieffer, Nobelpreis 1977 für ihre Theorie der Supraleitung, Badrean allein hat 1956 den Nobelpreis für den Transistor bekommen) ist ein Variationsansatz für den Grundzustand Er lautet

$$\psi_0 = \prod_k (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) |\text{vak}\rangle \quad (244)$$

Benutzt man die Vertauschungsrelationen der  $c_k^\dagger$ ,  $c_k$ , so erhält man

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \prod_k (u_k^2 + v_k^2) \quad (245)$$

Damit der Zustand normiert ist, fordern wir

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (246)$$

Damit kann man

$$u_k = \cos \phi_k, \quad v_k = \sin \phi_k \quad (247)$$

setzen. Analog erhält man

$$\langle N \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \quad (248)$$

$$\langle H - \mu N \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{U}{2V} \sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \quad (249)$$

Wir bestimmen  $\phi_k$ , indem wir diesen Ausdruck minimieren.

$$\frac{\partial \langle H - \mu N \rangle}{\partial \phi_k} = 4(\epsilon_k - \mu) u_k v_k - \frac{U}{V} \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} (u_k^2 - v_k^2) = 0 \quad (250)$$

Sei

$$\Delta = \frac{U}{2V} \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \quad (251)$$

Dann finden wir

$$2(\epsilon_k - \mu) u_k v_k = \Delta (u_k^2 - v_k^2) \quad (252)$$

Mit  $2u_k v_k = \sin 2\phi_k$ ,  $u_k^2 - v_k^2 = \cos 2\phi_k$  folgt

$$\tan 2\phi_k = \frac{\Delta}{\epsilon_k - \mu} \quad (253)$$

Daraus ergibt sich

$$\sin 2\phi_k = 2u_k v_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} \quad (254)$$

Damit erhält man

$$\Delta = \frac{U}{4V} \sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} \quad (255)$$

Eine triviale Lösung ist  $\Delta = 0$ . Sie liefert  $u_k = 1$ ,  $v_k = 0$  für  $\epsilon_k > \mu$  und umgekehrt  $u_k = 0$ ,  $v_k = 1$  für  $\epsilon_k < \mu$ . Das ist der übliche Fermisee, das chemische Potential bestimmt man aus der Teilchenzahl. Für eine nichttriviale Lösung ( $\Delta \neq 0$ ) muß

$$\sum_k \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} = \sum_k (1 - 2v_k^2) = N_s - N \quad (256)$$

gelten, wobei  $N_s$  die Anzahl der Zustände ist. Beschränkt man sich auf ein Energieintervall der Breite  $2\epsilon_0$ , daß symmetrisch um  $\mu$  liegt mit einer konstanten Zustandsdichte  $\rho(\epsilon_F)$ , dann findet man

$$1 = \frac{U}{4} \rho(\epsilon_F) \int_{-\epsilon_0}^{\epsilon_0} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} = \frac{\rho(\epsilon_F)U}{2} \ln \frac{2\epsilon_0}{\Delta} \quad (257)$$

Die Breite  $\epsilon_0$  ist von der Größenordnung der typischen Phononfrequenzen, also z.B.  $\hbar\omega_D$ , da diese Energieskala in der effektiven Wechselwirkung als Abschneideparameter auftritt. Damit ergibt sich

$$\Delta = 2\epsilon_0 \exp\left(-\frac{2}{\rho(\epsilon_F)U}\right) \quad (258)$$

Eine solche Lösung nennt man BCS-Lösung. Welche Lösung hat die niedrigere Energie? Dazu berechnen wir

$$\begin{aligned} \langle H - \mu N \rangle_{\text{BCS}} - \langle H - \mu N \rangle_{\text{normal}} & \quad (259) \\ &= 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{U}{2V} \sum_{k,k'} k_u v_k u_{k'} v_{k'} - 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) \theta(\epsilon_k - \mu) \end{aligned}$$

Aus  $2(\epsilon_k - \mu)u_k v_k = \Delta(u_k^2 - v_k^2)$  folgt  $2v_k^2 = 1 - 2v_k u_k (\epsilon_k - \mu) / \Delta$  und damit

$$2v_k u_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} \quad (260)$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} \langle H - \mu N \rangle_{\text{BCS}} - \langle H - \mu N \rangle_{\text{normal}} & \quad (261) \\ &= 2 \sum_k \left( \epsilon_k - \mu - 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) \theta(\epsilon_k - \mu) - \frac{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} \right) \end{aligned}$$

Wegen  $x^2 < x^2 + \frac{\Delta^4/4}{x^2 + \Delta^2} = \frac{(x^2 + \Delta^2/2)^2}{x^2 + \Delta^2}$  gilt  $|x| < \frac{x^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{x^2 + \Delta^2}}$ . Für  $\epsilon_k > \mu$  ist also

$$\epsilon_k - \mu - \frac{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} < 0$$

für  $\epsilon_k < \mu$

$$\mu - \epsilon_k - \frac{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}} < 0$$

Deshalb gilt

$$\langle H - \mu N \rangle_{\text{BCS}} - \langle H - \mu N \rangle_{\text{normal}} < 0 \quad (262)$$

Die Energiedifferenz ist

$$\Delta E = \frac{1}{2} \rho(\epsilon_F) \epsilon_0^2 \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{\epsilon_0^2}} \right) \approx -\frac{1}{4} \rho(\epsilon_F) \Delta^2 \quad (263)$$

### 5.5.4 Anregungen

Für das freie Elektronengas gilt  $c_{\vec{k}\sigma} |\text{vak}\rangle = 0$ . Ebenso kann man für den BCS-Zustand einen Operator finden, so daß  $\alpha\psi_0 = 0$  gilt.

$$(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l}) \psi_0 = \prod_{k \neq l} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) (v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l}) (u_l + v_l c_l^\dagger c_{-l}^\dagger) |\text{vak}\rangle \quad (264)$$

Es gilt

$$(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l}) (u_l + v_l c_l^\dagger c_{-l}^\dagger) = (u_l v_l c_l^\dagger - u_l v_l c_l^\dagger) = 0 \quad (265)$$

und also

$$(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l}) \psi_0 = 0 \quad (266)$$

Ich definiere

$$\begin{aligned} \alpha_{-k} &= u_k c_{-k} + v_k c_k^\dagger & \alpha_{-k}^\dagger &= u_k c_{-k}^\dagger + v_k c_k \\ \alpha_k &= u_k c_k + v_k c_{-k}^\dagger & \alpha_k^\dagger &= u_k c_k^\dagger + v_k c_{-k} \end{aligned} \quad (267)$$

Diese Transformation nennt man Bogoliubov-Transformation. Es gilt  $[\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = \delta_{k,k'}$ , alle anderen Antikommutatoren verschwinden. Man kann die ursprünglichen Erzeuger und Vernichter durch die  $\alpha$ 's ausdrücken

$$c_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger + v_k \alpha_{-k}, \quad c_{-k}^\dagger u_k \alpha_{-k}^\dagger + v_k \alpha_k \quad (268)$$

Damit gilt

$$c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} = (u_k^2 - v_k^2) (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + 2u_k v_k (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k) - 2v_k^2 \quad (269)$$

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = u_k^2 \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger - v_k^2 \alpha_{-k} \alpha_k + u_k v_k (1 - \alpha_k^\dagger \alpha_k - \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \quad (270)$$

$$c_{-k} c_k = u_k^2 \alpha_{-k} \alpha_k - v_k^2 \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + u_k v_k (1 - \alpha_k^\dagger \alpha_k - \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \quad (271)$$

$$\begin{aligned} H - \mu N &= \sum_k [(\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) + \frac{U}{V} u_k v_k \sum_{k'} u_{k'} v_{k'}] (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \\ &+ \sum_k [(\epsilon_k - \mu) 2u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \frac{U}{2V} \sum_{k'} u_{k'} v_{k'}] (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k) \\ &+ 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 \\ &- \frac{U}{2V} \sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \\ &+ \text{Term mit } (\alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger, \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha, \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha \alpha, \alpha^\dagger \alpha \alpha \alpha, \alpha \alpha \alpha \alpha) \end{aligned} \quad (272)$$

Dieser Ausdruck kann vereinfacht werden. Der Term in der zweiten Zeile verschwindet, und man erhält

$$\begin{aligned}
H - \mu N &= 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{U}{2V} \sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \\
&+ \sum_k \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \\
&+ \text{Term mit } (\alpha^\dagger)^m \alpha^{4-m}
\end{aligned} \tag{273}$$

Der erste Term beschreibt die Grundzustandsenergie. Nimmt man den Erwartungswert von  $H - \mu N$  mit dem BCS-Zustand  $\psi_0$ , so verschwinden alle anderen Beiträge. Diese Grundzustandsenergie ist also die Energie des BCS-Zustands. Die nächsten Terme beschreiben die Anregungsenergien von elementaren Anregungen vom Typ  $\alpha_k^\dagger \psi_0$ . Die Anregungsenergien sind  $\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} > \Delta$ . Es gibt also eine Energielücke im Spektrum. In dem BCS-Zustand treten die Elektronen paarweise auf. Dies Paare nennt man Cooperpaare. Um ein solches Paar aufzubrechen, muß man eine Energie von mindestens  $2\Delta$  aufwenden. Der dritte Term beschreibt Wechselwirkungen zwischen den Anregungszuständen. Er zeigt zum einen, daß der BCS-Zustand nicht der exakte Grundzustand ist, zum anderen, daß auch die Anregungen nicht exakt sind. Man kann aber annehmen, daß bei einer geringen Dichte von Anregungen diese Terme klein sind und nur sehr geringe Korrekturen liefern.

### 5.5.5 Berechnung der Sprungtemperatur

Bei endlichen Temperaturen muß man mit einem großkanonischen Potential rechnen:

$$G = \langle H - \mu N \rangle - TS \tag{274}$$

Diese Größe ist zu minimieren. Variationsansatz:

$$\rho \propto \exp(-\beta \sum_k \hat{\epsilon}_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k})) \tag{275}$$

$\hat{\epsilon}_k$  und  $\phi_k$  sind Variationsparameter. Für  $T \rightarrow 0$  wird  $\rho$  der Projektor auf den BCS-Zustand. Es gilt

$$S = \text{Tr} \rho \ln \rho = -2 \sum_k \left[ \ln(1 + \exp(-\beta \hat{\epsilon}_k)) + \frac{\beta \hat{\epsilon}_k}{\exp(\beta \hat{\epsilon}_k) + 1} \right] \tag{276}$$

$S$  ist unabhängig von  $\phi_k$ .

$$\begin{aligned}
\langle H - \mu N \rangle &= 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 \\
&+ 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) f(\hat{\epsilon}_k) \\
&- \frac{U}{2V} \left( \sum_k u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k))^2 \right)
\end{aligned} \tag{277}$$

Sei

$$\Delta(T) = \frac{U}{2V} \sum_k u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) \quad (278)$$

$$\langle H - \mu N \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) [v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) f(\hat{\epsilon}_k)] - \Delta(T) \sum_k u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) \quad (279)$$

$$\frac{\partial G}{\partial \phi_k} = \frac{\partial \langle H - \mu N \rangle}{\partial \phi_k} = 4(\epsilon_k - \mu) u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) - 2\Delta(T) (u_k^2 - v_k^2) (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) = 0 \quad (280)$$

Damit gilt wie bisher

$$2(\epsilon_k - \mu) u_k v_k = \Delta(T) (u_k^2 - v_k^2) \quad (281)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \hat{\epsilon}_k} &= 2(\epsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) \frac{\partial f(\hat{\epsilon}_k)}{\partial \hat{\epsilon}_k} + 4\Delta(T) u_k v_k \frac{\partial f(\hat{\epsilon}_k)}{\partial \hat{\epsilon}_k} \\ &\quad - f(\hat{\epsilon}_k) + f(\hat{\epsilon}_k) + 2\hat{\epsilon}_k \frac{\partial f(\hat{\epsilon}_k)}{\partial \hat{\epsilon}_k} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (282)$$

Damit gilt

$$\hat{\epsilon}_k = (\epsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta(T) u_k v_k = \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} \quad (283)$$

Es gibt wie bisher für alle Temperaturen die triviale Lösung  $\Delta = 0$ . Für eine nicht-triviale Lösung gilt

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\hat{\epsilon}_k - 2\Delta(T) u_k v_k}{\epsilon_k - \mu} \quad (284)$$

$$2u_k v_k = \frac{\Delta(T)}{\hat{\epsilon}_k} \quad (285)$$

$$\Delta(T) = \frac{U}{4V} \sum_k \frac{1}{\hat{\epsilon}_k} (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) \quad (286)$$

$$1 = \frac{U}{4V} \sum_k \frac{1}{\hat{\epsilon}_k} \frac{1 - \exp(-\beta \hat{\epsilon}_k)}{1 + \exp(-\beta \hat{\epsilon}_k)} \quad (287)$$

Jeder Term in der Summe ist eine monoton fallende Funktion von  $\hat{\epsilon}_k$ . Eine nichttriviale Lösung gibt es nur dann, wenn

$$\frac{U}{4V} \sum_k \frac{1}{(\epsilon_k - \mu)} \frac{1 - \exp(-\beta(\epsilon_k - \mu))}{1 + \exp(-\beta(\epsilon_k - \mu))} > 1 \quad (288)$$

Beschränkt man sich wie oben auf ein Energieintervall der Breite  $2\epsilon_0$ , symmetrisch um  $\mu$ , mit einer konstanten Zustandsdichte  $\rho(\epsilon_F)$ , so erhält man für die Sprungtemperatur  $T_c$

$$\frac{U \rho(\epsilon_F)}{4} \int_0^{\epsilon_0/k_B T_c} \frac{dx}{x} \frac{1 - \exp(-x)}{1 + \exp(-x)} = 1 \quad (289)$$

Das Integral ist für tiefe Temperaturen  $\epsilon_0/k_B T_c \gg 1$  etwa  $0.13 + \ln \epsilon_0/k_B T_c$ . Damit gilt

$$T_c = 1.14\epsilon_0/k_B \exp(-2/U\rho(\epsilon_F)) = 0.57\Delta(0)/k_B \quad (290)$$

In gleicher Näherung gilt

$$\Delta(T) = 3.06k_B T_c \sqrt{1 - T/T_c} \quad (291)$$

Man kann also aus der Energielücke bei  $T = 0$  die Sprungtemperatur  $T_c$  bestimmen. Der Parameter, von dem  $T_c$  wesentlich abhängt, ist  $U\rho(\epsilon_F)$ . Für unseren Modell-Hamiltonoperator kann man so vorgehen, daß man  $U\rho(\epsilon_F)$  aus  $T_c$  bestimmt und daraus alle weiteren Größen (Anregungsenergien, etc.). Man kann aber auch einen Modell-Hamiltonoperator benutzen, wie wir ihn am Anfang des Kapitels mit Hilfe der Störungsrechnung oder mit Hilfe der Flußgleichungen hergeleitet haben. Konkrete Rechnungen zeigen, daß man aus dem störungstheoretischen Resultat  $T_c$ -Werte erhält, die um etwa eine Größenordnung zu hoch sind. Mit dem Resultat aus den Flußgleichungen kann man  $T_c$  dagegen recht gut berechnen, wenn man noch die Coulombabstoßung berücksichtigt.

## Literatur

- [1] A.O. Caldeira und A.J. Leggett: Ann. Phys. (N.Y.) **149**, 374 (1983); **153**, 445(E) (1984).
- [2] A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg und W. Zwerger: Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987); erratum Rev. Mod. Phys. **67**, 725 (1995).
- [3] U. Weiss: Quantum Dissipative Dynamics, Series in modern condensed matter physics, vol.2. World Scientific, Singapore (1993).
- [4] S. Kehrein, A. Mielke und P. Neu: Z.Phys. B **99**, 269 (1996).
- [5] S. Kehrein und A. Mielke: Ann. Phys. (Leipzig) **6**, 90-135 (1997).
- [6] S. Kehrein und A. Mielke: J. Stat. Phys. **90**, 889-898 (1998).
- [7] A.C. Hewson, "The Kondo Problem to Heavy Fermions." Cambridge Studies in Magnetism, Vol. 2, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1993.
- [8] J.R. Schrieffer und P.A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [9] S. Kehrein und A. Mielke: Ann. Phys. (NY) **252**, 1-32 (1996).
- [10] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [11] A.M. Tsvelick und P.B. Wiegmann, Adv. Phys. **32**, 453 (1983).
- [12] A. Würger, "From Coherent Tunneling to Relaxation." Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1997.
- [13] H. Fröhlich, Proc. Phys. Soc. **A160**, 230 (1937).

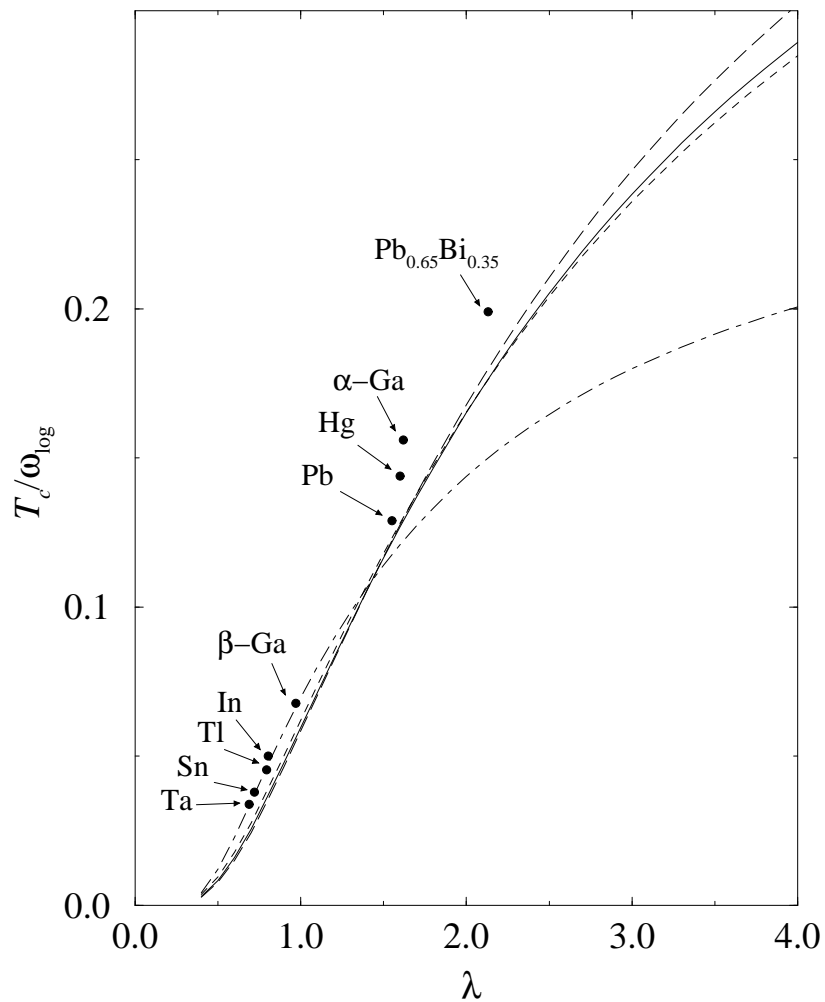


Abbildung 1:  $T_c/\omega_{\log}$  für verschiedene Typen von Phonon-Spektren. Gezeigt werden Resultate aus Rechnungen mit Flußgleichungen (etwas abgewandelt), eine an die Experimente bei kleinen  $T_c$  angepasste Kurve und einige experimentelle Ergebnisse. Aus: Mielke, A.: 'Calculating superconducting transition temperatures in a renormalized Hamiltonian framework.' *Europhys. Lett.* **40**, 195-200 (1997).

- [14] O. Madelung, "Festkörpertheorie II." Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1972 (Heidelberger Taschenbücher, Band 109).
- [15] S.I. Pekar, "Untersuchung über die Elektronentheorie der Kristalle." Akademie-Verlag Berlin 1954.