

Quantendiffusion bei weißem und farbigem Rauschen

Diplomarbeit
vorgelegt von
Henning Schomerus

Hauptberichter: Prof. Dr. rer. nat. U. Weiss
Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. M. Wagner

II. Institut für Theoretische Physik
Universität Stuttgart

Juli 1993

Die Göttin empfing mich, ergriff voll Huld meine Rechte, nahm das Wort und sprach: »Jüngling, der Du, von göttlichen Wagenlenkern geleitet, mit den Rossen, die Dich tragen, Dich unserm Haus nahst, sei mir begrüßt! Kein geringeres Geschick, sondern Themis und Dike leitete Dich, diesen Weg zu nehmen, der da außerhalb ist der von Menschen betretenen Pfade. So sollst Du denn alles erfahren: der wohlgerundeten Wahrheit nie wankendes Herz und das Scheinwesen menschlicher Setzung, die ohne Verlaß ist und ohne Wahrheit. Aber gleichwohl sollst Du auch das erfahren, wie das nur Gesetzte geltend werden sollte und wie solche Geltung alles mit ihrem Scheinwesen hat durchdringen müssen[...]¹

$$\begin{aligned}
 S = & \int \left[\frac{1}{g_c^2} \text{Tr} \left(\begin{matrix} SU(2) & (g)SU(2) \\ F \wedge * & F \end{matrix} \right) + \frac{1}{2g_c'^2} \text{Tr} \left(\begin{matrix} U(1) & (g)U(1) \\ F \wedge * & F \end{matrix} \right) + \frac{1}{g_s^2} \text{Tr} \left(\begin{matrix} SU(3) & (g)SU(3) \\ F \wedge * & F \end{matrix} \right) \right. \\
 & \left. + \bar{\Psi} i \begin{matrix} (g) \\ * \end{matrix} \gamma \wedge \mathcal{D}\Psi + (\bar{\Psi}(\Phi C)\Psi + \text{h. c.}) + (D\Phi)^+ \wedge \begin{matrix} (g) \\ * \end{matrix} (D\Phi)^- \begin{matrix} (g) \\ * \end{matrix} (\mu^2 |\Phi|^2 + \lambda |\Phi|^4) - \frac{1}{\kappa} R \right] \\
 & + \text{Oberflächenterm} = 42
 \end{aligned}$$

2

¹Parmenides, *Lehrgedicht des Parmenides* (Elea, etwa 500 v. Chr.)

²Th. Heck, Dissertation (in Bearbeitung, Universität Stuttgart, 1993)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Übersicht	5
2	Grundlagen	9
2.1	Das klassische diffusive Teilchen	9
2.2	Das Caldeira–Leggett–Modell	10
2.2.1	Der Hamiltonian	10
2.2.2	Die spektrale Dichte der Kopplung	11
2.2.3	Die Bewegungsgleichung	12
2.2.4	Mikroskopische und makroskopische Größen	13
2.3	Lineare Antworttheorie	16
2.3.1	Die Antwortfunktion	16
2.3.2	Das Fluktuations–Dissipations–Theorem	18
2.3.3	Anwendung auf das Caldeira–Leggett–Modell	19
2.3.4	Behandlung mit der klassischen Antworttheorie	24
2.4	Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik	26
2.4.1	Das Pfadintegral	27
2.4.2	Semiklassische Behandlung von Pfadintegralen	30
2.4.3	Instantonen	32
2.4.4	Das Influenzfunktional	34
2.4.5	Anwendung auf das Caldeira–Leggett–Modell	37

3	Quantendiffusion auf dem Tight–Binding–Gitter	41
3.1	Das Tight–Binding–Modell	41
3.2	Formal exakte Lösungen	44
3.2.1	Durchführung der Pfadintegration	44
3.2.2	Das erzeugende Funktional und die ersten beiden Momente	47
3.2.3	Differenzzeiten und Laplacetransformation	48
3.2.4	Das Ladungsbild	49
3.3	Langzeitverhalten	50
3.3.1	Die Wechselwirkungsterme	50
3.3.2	Konvergenz der Integrale für $1 \leq s < 2$	52
3.3.3	Subohmsche Dissipation	52
3.4	Übersicht über die Parameterbereiche	55
4	Nichtlineare subohmsche Dynamik im Tight–Binding–Modell	58
5	Quantendiffusion im Cosinuspotential	61
5.1	Durchführung der Pfadintegration	62
5.2	Das erzeugende Funktional	65
5.3	Das erste und das zweite Moment	68
6	Die Dualitätstransformation	70
6.1	Der Fall ohmscher Dissipation	70
6.2	Nichtohmsche spektrale Dichten	74
7	Nichtohmsche Dynamik im Cosinuspotential	81
7.1	Das erzeugende Funktional im subohmschen Regime	81
7.2	Einsteinrelation für $s \leq 1$	82
7.3	Dynamik im superohmschen Regime	84
7.4	Einsteinrelation im superohmschen Regime	89

8	Direkte Abbildung der Systeme	92
8.1	Der Tight-Binding-Hamiltonian	93
8.2	Methode 1: Lagrangeformalismus	94
8.2.1	Die Lagrangefunktion	94
8.2.2	Die Bewegungsgleichungen	96
8.3	Methode 2: Kanonische Transformationen	98
8.4	Methode 3: Dichtematrix und Influenzfunktional	101
8.4.1	Die Dichtematrix	101
8.4.2	Ortskopplung und Influenzfunktional	102
8.5	Erweiterung auf allgemeine periodische Potentiale	105
8.6	Mobilität und Korrelationsfunktionen	105
8.6.1	Kraft im Cosinuspotential	106
8.6.2	Kraft im Tight-Binding-Gitter	107
9	Modellsysteme, Experimente und Anwendungen	109
9.1	Transport schwerer geladener Teilchen in Metallen	109
9.2	Josephsonkontakte mit Coulombblockade	112
10	Zusammenfassung	116
A	Jacobische Determinante der Langevingleichung	118
B	Diagonalisierung des Bades	121

Kapitel 1

Einleitung und Übersicht

Die Quantenmechanik dissipativer Systeme hat im letzten Jahrzehnt ein großes Interesse genossen. Aufbauend auf den Arbeiten von Feynman und Vernon [1] sowie Caldeira und Leggett [2, 3] wurde ein Formalismus entwickelt, der auf Fragestellungen des Zerfalls eines metastabilen Teilchens [4]–[7], der Dynamik und Thermodynamik eines gedämpften harmonischen Oszillators [8]–[11] und des Teilchens im Doppelpotenzial bzw. Zwei-Zustands-System [12]–[22] ebenso angewandt werden kann wie auf das Tunneln mit Coulombblockade in Josephsonkontakten [2], [23]–[29], [51], um nur ein paar Beispiele zu nennen. Einen umfassenden Überblick über den Stand der Forschung gibt das Buch von Weiss [30].

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit den Transporteigenschaften eines quantenmechanischen Teilchens mit einem translativen Freiheitsgrad, welches an ein Wärmebad gekoppelt ist und sich in einem periodischen Potential unter der Wirkung einer äußeren Kraft bewegt [31]–[43]. Die klassischen Gleichungen entsprechen zudem formal den Josephsongleichungen, so daß sich die Ergebnisse auch zur Berechnung der Strom-Spannungskennlinie von Josephson-Tunnelkontakten mit parallelgeschaltetem ohmschen Widerstand und der Dynamik des Tunnelns des magnetischen Flusses in einem SQUID heranziehen lassen [2, 29, 42]. Nur in einem gewissen Rahmen, und zwar für räumlich lokalisierte Vorgänge, lassen sich die Ergebnisse auf die Diffusion geladener Teilchen in Metallen anwenden [44]–[53]. Nach Waxman [54] ist ihr Anwendungsrahmen gegebenenfalls aber auch größer.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Diskussion und Erweiterung der Dualitätstransformation, die die Dynamik eines Teilchens im Tight-Binding-Gitter mit der im Cosinuspotential verknüpft [64, 65]. Die Erweiterung dieser Abbildung auf beliebige spektrale Dichten geschieht zunächst anhand der formal exakten Ausdrücke für die ersten beiden Momente. Anschließend wird auch die direkte Abbildung der Hamiltonians beider Systeme aufeinander durchgeführt.

Weiterhin werten wir die formal exakten Ergebnisse im Cosinuspotentials für superohmsche Dissipation aus und gelangen zu neuen Ergebnissen. Danach ver-

halten sich die ersten beiden Momente linear mit der Zeit und gehorchen der Einsteinrelation. Damit wird eine Lücke geschlossen, die in der bisherigen Literatur bestand [41]. Für subohmsche Dissipation im Tight-Binding-Gitter zeigen wir, daß sich das erste Moment für beliebige Kräfte wie beim freien Brownschen Teilchen verhält, nachdem dies für kleine Kräfte bereits bekannt war [39].

Im folgenden geben wir eine Übersicht über den Inhalt der einzelnen Kapitel an.

Die Bewegung des Teilchens wird im klassischen Limes durch eine eindimensionale Langevingleichung beschrieben, in der sich das Wärmebad über den Dämpfungskern und eine stochastische Kraft bemerkbar macht. Beide Einflüsse sind nicht unabhängig voneinander, sondern durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem miteinander verknüpft. Das Auftreten des Dämpfungskerns führt dazu, daß die Bewegung des Teilchens irreversibel ist; die Zeitumkehrinvarianz ist verletzt. Dies ist eine Konsequenz des thermodynamischen Limes, in dem die Zahl der Freiheitsgrade des Bades gegen unendlich geht.

Im Rahmen der Quantenmechanik tritt mit der Interferenz bzw. Kohärenz ein Effekt auf, der im Rahmen der klassischen Mechanik unbekannt ist. Auch er wird durch das Wärmebad beeinflusst. Die Zerstörung der Kohärenz beruht wie die Rauschkraft der Langevingleichung auf der stochastischen Natur des Wärmebades im thermodynamischen Limes. Mit steigender Temperatur des Wärmebades nimmt die Kohärenz immer mehr ab, bis der klassische Limes erreicht wird. Dabei ist die Existenz einer in vielen Fällen wohldefinierten Übergangstemperatur T^* bemerkenswert [5].

In der Quantenmechanik dient die reduzierte Dichtematrix zur Beschreibung der Dynamik eines effektiven Einteilchensystems. Es existieren mehrere Methoden, die Zeitentwicklung dieser Matrix zu beschreiben. Sie führen zu erweiterten Pauli-Mastergleichungen in Form von Integro-Differentialgleichungen oder Differentialgleichungen mit zeitabhängigen Koeffizienten [55]. Einen anderen Ansatz verfolgt die lineare Antworttheorie, mit der Vielteilchensysteme auch bei endlichen Temperaturen behandelt werden können. Sie liefert dabei auch Aussagen über die Einteilcheneigenschaften [56]–[63].

Eine für unsere Aufgabenstellung optimal angepaßte Beschreibungsweise ist die von Feynman und Vernon [1], in deren Rahmen die reduzierte Dichtematrix in Ortsdarstellung als doppeltes Funktionalintegral¹ ausgedrückt wird; der Einfluß des Wärmebads macht sich allein in der Kopplung der Beiträge beider Wege bemerkbar. Mit diesem Formalismus ist ein direkter Zugang zur Dynamik gegeben.

Das Caldeira-Leggett-Modell beschreibt das Wärmebad als Ansammlung von harmonischen Oszillatoren [2, 3]. Es können unterschiedliche Bäder modelliert werden. Alle für das Subsystem wesentlichen Eigenschaften des Bades können über eine gewichtete spektrale Dichtefunktion der Badoszillatoren ausgedrückt werden.

¹auch Pfadintegral; engl.: path integral

Das Modell liefert klassisch die Langevingleichung und kann ohne weiteres auf die Quantenmechanik übertragen werden. Für das Caldeira–Leggett–Modell erhält die Kopplung der Wege eine Form, in der die verallgemeinerte dynamische Suszeptibilität der Badoszillatoren auftritt. Die semiklassische Näherung des Funktionalintegrals führt zur Langevingleichung und gibt somit einen tieferen Einblick in die Natur der gewählten Beschreibungsweise.

Das **2. Kapitel** stellt eine Einführung in die soeben beschriebenen mathematischen, physikalischen und methodischen Grundlagen dar.

Im **3. Kapitel** wird der Tight–Binding–Limes behandelt. Das Teilchen bewegt sich auf einem diskreten Gitter, der Transport geschieht durch Tunneln. Mit Hilfe der Instantonentechnik ist es im Rahmen der Funktionalintegralmethode möglich, diese Tunnelprozesse nichtperturbativ einzubeziehen. Damit erhält man formal exakte Ergebnisse. Sie sind Ausgangspunkt für die Formulierung allgemeiner Aussagen, worunter auch die Einsteinrelation fällt. Es werden einige bekannte analytische Ergebnisse vorgestellt, um die Problemstellung sowie die Rechentechniken für das weitere Vorgehen zu verdeutlichen.

Im **4. Kapitel** wird eine erweiterte Rechnung für Bäder mit farbigem Rauschen vorgestellt. Wir behandeln das nichtlineare erste Moment im Fall subohmscher Dämpfung.

Im **5. Kapitel** wird die Bewegung in einem Cosinuspotential behandelt. Auch in diesem Fall ist es möglich, die Pfadintegrale zu lösen, und man gelangt erneut zu formal exakten Ausdrücken.

Das **6. Kapitel** führt in die Dualitätstransformation ein, einer Abbildung zwischen Größen und Parametern von Cosinuspotential und Tight–Binding–Modell. Die Natur des Transportmechanismus im Cosinuspotential ist eine völlig andere als im Tight–Binding–Modell; die Bewegung ist räumlich kontinuierlich und somit auch topologisch gänzlich verschieden. Um so bemerkenswerter ist somit die Existenz einer Abbildung beider Systeme aufeinander, die von Schmid [64] sowie Fisher und Zwerger [65] für den Fall ohmscher Dissipation, also weißen Rauschens, aufgestellt wurde. Einen breiten Raum nimmt die Verallgemeinerung dieser Transformation auf Systeme ein, in denen das Teilchen farbigem Rauschen ausgesetzt ist, das Bad also durch nichtohmsche spektrale Dichten beschrieben wird.

Im **7. Kapitel** wird dargelegt, wie es mit Hilfe der verallgemeinerten Dualitätstransformation gelingt, das Langzeitverhalten im Cosinuspotential für superohmsche spektrale Dichten zu finden. Zudem werden bereits bekannte Ergebnisse für ohmsche und subohmsche Dissipation reproduziert.

In **Kapitel 8** wenden wir uns einer direkten Transformation zwischen Cosinuspotential und Tight–Binding–Gitter zu. Dieses Kapitel bildet den Hauptteil der vorliegenden Arbeit.

Das **Kapitel 9** widmet sich kurz der experimentellen Überprüfbarkeit der Ergebnisse und geht auf ab initio Herleitungen zum Transport in Metallen ein. Weiter wird der Zusammenhang zwischen dem Transport im periodischen Potential und der Strom–Spannungscharakteristik von Josephsonkontakten erläutert.

Eine **Zusammenfassung** der Ergebnisse bildet den Abschluß dieser Arbeit.

Die gewählte Darstellung stellt den Versuch dar, einen Mittelweg zwischen einem in sich abgeschlossenen und einem mathematisch konzisen Zugang zur behandelten Thematik zu finden. Ziel war es, eine gute Lesbarkeit mit einem möglichst großem Informationsgehalt zu verbinden. Neue Ergebnisse befinden sich in den Kapiteln 4, 6, 7 und 8. Der Autor wünscht dem Leser eine anregende Lektüre.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Das klassische diffusive Teilchen

Die Beschreibung eines klassischen Teilchens in Ankopplung an ein Wärmebad geschieht am einfachsten durch Aufstellen einer effektiven Bewegungsgleichung für das Teilchen, in der die dynamischen Eigenschaften des Bades nicht mehr vorkommen. Wir beschränken uns dabei auf den Fall, daß dies mit einer Langevin-Gleichung der allgemeinen Form

$$m\ddot{q}(t) + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \eta(t-t') \dot{q}(t') + \frac{\partial V(q)}{\partial q} = \xi(t) \quad (2.1)$$

gelingt. $\eta(t)$ ist der Dämpfungskern und beschreibt die Dissipation. Da die Geschwindigkeit linear auftritt, spricht man von linearer Reibung. $\xi(t)$ ist die stochastische Kraft, die das Bad auf das Teilchen ausübt. Dabei soll für die Mittelung dieser Kraft über die verschiedenen Rauschkrafttrajektorien $\xi(t)$ im Sinne eines klassischen stochastischen Prozesses

$$\langle \xi(t) \rangle_{\xi} = 0 \quad (2.2)$$

gelten.

Die Langevin-Gleichung unterscheidet sich von einer Newtonschen Bewegungsgleichung neben ihrer stochastischen Natur noch dadurch, daß sie nicht zeitumkehrinvariant ist. Dies ist ein Ergebnis des thermodynamischen Limes, in dem das Bad unendlich viele Freiheitsgrade hat, die Poincarésche Wiederkehrzeit also unendlich groß ist. Die Gleichung beschreibt zudem Gedächtniseffekte, da die Dynamik des Bades zu einer effektiven Selbstwechselwirkung des Teilchens zu verschiedenen Zeiten führt. Darauf werden wir im nächsten Abschnitt näher eingehen. Damit die Kausalität nicht verletzt wird, ist

$$\eta(t) = 0 \quad \text{für } t < 0 \quad (2.3)$$

zu fordern. Präpariert man das Teilchen zum Zeitpunkt $t = t_0$, so ist seine Trajektorie zu kleineren Zeiten nicht definiert; die Integration im Dämpfungsterm von (2.1) beginnt dann bei t_0 .

2.2 Das Caldeira–Leggett–Modell

2.2.1 Der Hamiltonian

Ein Modell für das Bad und die Kopplung zwischen ihm und dem Teilchen ist das von Caldeira und Leggett¹ [2, 3], welches auch später für die quantenmechanische Behandlung der Diffusion die Grundlage bilden wird. Dieser phänomenologische Ansatz behandelt das Bad in einer linearen Antwortnäherung und ist ein Vertreter mehrerer anderer denkbarer Modelle mit ähnlichen Eigenschaften. Auf die Versuche, einen solchen Hamiltonian herzuleiten, werden wir kurz im letzten Kapitel zurückkommen.

Das Bad wird durch eine Ansammlung von harmonischen Oszillatoren beschrieben. Der Hamiltonian des Gesamtsystems hat dabei die Form

$$H(q, p, \{x_i\}, \{p_i\}) = \frac{1}{2m}p^2 + V_0(q) - Fq + \sum_i \left\{ \frac{1}{2m_i}p_i^2 + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i(q)q}{m_i\omega_i^2} \right)^2 \right\}. \quad (2.4)$$

Die Summation erstreckt sich über alle Badoszillatoren. Die Kopplung zwischen Bad und Teilchen erfolgt über die Ortskoordinaten und ist zunächst linear in den Badkoordinaten, jedoch nicht in der Teilchenkoordinate. Es wird also angenommen, daß die Badfreiheitsgrade nur schwach gestört werden und im Rahmen einer linearen Antwortnäherung behandelt werden können. Da das Bad sehr viele Oszillatoren enthält, bedeutet diese Annahme keine Einschränkung für die Größe des Einflusses des Wärmebades auf das Teilsystem. Im folgenden werden wir uns nur noch mit dem Fall einer linearen Kopplung auch in der Teilchenkoordinate beschäftigen. Dem entspricht $C_i(q) = C_i = \text{const.}$ Andernfalls würde man zu einer zustandsabhängigen Reibung gelangen, deren Behandlung nur schwer möglich erscheint [2].

Darüberhinaus ist eine Renormierung des Potentials durch die Kopplung im obigen Ausdruck kompensiert. Nach der Relaxation des Bades in das Energieminimum bezüglich einer festen Teilchenkoordinate bewegt sich das Teilchen im effektiven Potential $V_0(q)$. Wird das Teilchen einer äußeren Kraft ausgesetzt, steht

¹Das Modell hat eine lange Geschichte und wurde schon in den 60er Jahren von Rubin [66, 67], Senetzky [68], Ford, Kac und Mazur [69], Ullersma [70] und Zwanzig [71] zur Beschreibung dissipativer Systeme benutzt.

seiner ungehinderten Beschleunigung die quadratische Deformation des nackten Potentials durch die Badoszillatoren entgegen. Die Oszillatoren mit den kleinsten Schwingungsfrequenzen folgen dem Teilchen am langsamsten und bestimmen somit dessen Langzeitverhalten.

2.2.2 Die spektrale Dichte der Kopplung

Die Ankopplung an das Wärmebad wird im Caldeira–Leggett–Modell durch die gewichtete spektrale Dichte

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \quad (2.5)$$

charakterisiert. Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ wird $J(\omega)$ zu einer stetigen Funktion. Sie wird gelegentlich als ungerade Funktion auf $(-\infty, +\infty)$ aufgefaßt.

Die Kopplung an das Bad wird qualitativ nach ihrem Verhalten im niederfrequenten Bereich des Spektrums klassifiziert. Wird sie dort durch

$$J(\omega) = \eta_s \omega^s = m \gamma_s \omega^s \quad (\omega \rightarrow 0) \quad (2.6)$$

beschrieben, so hat man für $0 < s < 1$ subohmsche, für $s = 1$ ohmsche und für $s > 2$ superohmsche Dissipation. Strikt ohmsche Dissipation liegt für

$$J(\omega) = \eta \omega = m \gamma \omega \quad (2.7)$$

vor. Die spektrale Dichte läßt sich zum Beispiel für akustische Phononen bei isotroper Kopplung in der Form [30]

$$J(\omega) = \frac{\pi}{D} \rho(\omega) \frac{g^2(\omega) k^2(\omega)}{\hbar \omega} \quad (2.8)$$

schreiben, in der sie durch die Zustandsdichte $\rho(\omega)$, die Kopplungsstärkefunktion $g(\omega)$ und die Dispersionsbeziehung $k(\omega)$ ausgedrückt wird. D gibt die Zahl der Dimensionen an. In Kapitel 8 werden wir näher auf mikroskopische Modelle eingehen.

Die Zahl der Parameter des Bades läßt sich häufig durch die Forderung

$$C_i = m_i \omega_i^2 \quad (2.9)$$

reduzieren. Dann nimmt der Kopplungsterm eine einfache Form an und läßt die anschauliche Interpretation zu, daß an das Teilchen direkt harmonische Oszillatoren befestigt sind. Es verbleiben genügend Freiheiten, eine beliebige spektrale Dichte zu modellieren, die nun die Form

$$J(\omega) = \sum_{i=1}^N \omega_i C_i \delta(\omega - \omega_i) = \omega C(\omega) \rho(\omega) \quad (2.10)$$

annimmt. $C(\omega)$ ist erneut eine Kopplungsstärkefunktion.

2.2.3 Die Bewegungsgleichung

Die klassischen Bewegungsgleichungen zum Caldeira–Leggett–Hamiltonian lauten nach Fouriertransformation

$$\begin{aligned} m\omega^2\tilde{q}(\omega) + \sum_i C_i \left(\tilde{x}_i(\omega) - \frac{C_i\tilde{q}(\omega)}{m_i\omega_i^2} \right) - \tilde{V}'(\omega) &= 0; \\ \omega^2\tilde{x}_i(\omega) - \omega_i^2 \left(\tilde{x}_i(\omega) - \frac{C_i\tilde{q}(\omega)}{m_i\omega_i^2} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Diese Gleichungen sind wegen der Linearität der Kopplung nach den Badoszillatoren auflösbar:

$$\tilde{x}_i(\omega) = \frac{C_i\tilde{q}(\omega)}{m_i(\omega_i^2 - \omega^2)} + \frac{A_i}{2}\delta(\omega - \omega_i) + \frac{A_i^*}{2}\delta(\omega + \omega_i). \quad (2.12)$$

Die δ -Funktionen treten wegen der Unbestimmtheit des Ausdruckes $(\omega_i^2 - \omega^2)\tilde{x}_i(\omega)$ an den Stellen $\omega = \pm\omega_i$ auf und liefern den homogenen Teil der Lösung.

Die verbleibende effektive Bewegungsgleichung für das Teilchen

$$m\omega^2\tilde{q}(\omega) + \tilde{K}(\omega)\tilde{q}(\omega) - \tilde{V}'(\omega) = -\frac{1}{2}\sum_i C_i (A_i\delta(\omega - \omega_i) + A_i^*\delta(\omega + \omega_i)) = -\tilde{\xi}(\omega) \quad (2.13)$$

entspricht der fouriertransformierten Langevingleichung (2.1).

Bei der Rücktransformation kann man im Dämpfungsterm mit

$$\tilde{K}(\omega) = i\omega\eta(\omega) = i\omega m\gamma(\omega) \quad (2.14)$$

einen Faktor $i\omega$ auf $\tilde{q}(\omega)$ abwälzen. Präpariert man das Teilchen zum Zeitpunkt $t = 0$, so ist jedoch darauf zu achten, daß an der Stelle von $\tilde{q}(\omega)$ die Fouriertransformierte von $\Theta(t)q(t)$ steht. Beim Ableiten erhalten wir somit eine δ -Funktion, die uns den Zusatzterm

$$q_0\eta(t) = q_0 \sum_i \frac{C_i^2}{m_i\omega_i^2} \cos(\omega_i t) \quad (2.15)$$

liefert. Dieser scheint wegen des Auftretens des Anfangsortes q_0 des Teilchens die Ortstranslationsinvarianz zu verletzen. Allerdings haben wir bei der Integration der Bewegungsgleichungen der Badoszillatoren die Anfangsbedingung des Teilchens ebenfalls nicht berücksichtigt und somit keine Translation im Bad durchgeführt. Damit sind wir zu einer Rauschkraft gelangt, die (2.2) verletzt. Dieser Beitrag wird gerade durch $q_0\eta(t)$ kompensiert. Insgesamt gelangen wir damit genau zur Langevingleichung (2.1). Später, bei der quantenmechanischen Behandlung mittels der Influenzfunktionaltechnik, wird dieser Term wieder auftauchen. Er verschwindet dort nicht, da das Teilchen im quantenmechanischen Regime

auch an einem anderen Ort als an dem durch seinen Mittelwert gegebenen starten kann. Das Bad werden wir jedoch im Rahmen der betrachteten faktorisierten Anfangsbedingungen als mit einem im Ursprung ruhenden Teilchen relaxiert ansehen. Erst unter Bildung des Erwartungswertes ist dann wieder die Translationsinvarianz hergestellt sowie (2.2) erfüllt.

2.2.4 Mikroskopische und makroskopische Größen

Wie wir im Rahmen des Pfadintegralformalismus sehen werden, ist für die Dynamik des Teilchens nur die spektrale Dichte $J(\omega)$ von Bedeutung. Sie stellt also die relevante Kombination der mikroskopischen Parameter des Caldeira–Leggett–Hamiltonians dar. Für die Verwendung des Modells ist es von Bedeutung, ob $J(\omega)$ durch die makroskopisch meßbaren Größen festgelegt ist.

\tilde{K} und η hängen mit (2.13) folgendermaßen von $J(\omega)$ ab:

$$\tilde{K}(\omega) = \frac{2\omega^2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} ; \quad (2.16)$$

$$\tilde{K}(t) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega t) \Theta(t) + \delta(t) \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} ; \quad (2.17)$$

$$\eta(\omega) = -\frac{2i}{\pi} \omega \int_0^\infty d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} ; \quad (2.18)$$

$$\eta(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \Theta(t) . \quad (2.19)$$

Bei der Rücktransformation wurden die Pole so behandelt, daß die Kausalitätsbedingung (2.3) erfüllt wird. Genaugenommen hat man es dann mit analytisch fortgesetzten Laplacetransformationen zu tun. Die Frequenz ω besitzt somit einen kleinen Imaginärteil, der für die Kausalität des Dämpfungskernes sorgt. Anhand der Gleichungen erkennt man die Beziehung

$$\tilde{K}(t) = \dot{\eta}(t) . \quad (2.20)$$

Desweiteren gilt

$$\eta'(\omega) = \frac{J(\omega)}{\omega} . \quad (2.21)$$

Das Bad des von uns betrachteten phänomenologischen Modellsystems ist also tatsächlich vollständig durch sein klassisches Verhalten bestimmt.

Für strikt ohmsche Dissipation (2.7) ist $\eta(\omega)$ konstant; das Bad vermittelt dem Teilchen dann keine Gedächtniseffekte.

Ähnlich wie beim Übergang von retardierten zu kausalen Greenschen Funktionen modifizieren wir das Spektrum von \tilde{K} nun dadurch, daß wir die Pole auf beide Seiten der reellen Achse verschieben. Man erhält dann die Größe

$$K_2(\tau) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin(\omega\tau) , \quad (2.22)$$

für die die Beziehung

$$K_2(\tau) = \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} (\eta(\tau) + \eta(-\tau)) = \frac{1}{2} (\dot{\eta}(\tau) - \dot{\eta}(-\tau)) \quad (2.23)$$

gültig ist.

In den komplexen Integrationskonstanten $A_i = |A_i| \exp(i\phi_i)$ aus (2.12) stecken die Anfangsbedingungen des Bades. Sie sorgen für die Rauschkraft

$$\xi(t) = \sum_i C_i |A_i| \cos(\omega_i t + \phi_i) , \quad (2.24)$$

die rein stochastischer Natur ist, da das System im thermodynamischen Limes unendlich viele Freiheitsgrade hat. Dennoch lassen sich über die Rauschkraft Aussagen treffen. Die Amplituden der Badoszillatoren sind bei einer festen Temperatur gemäß der Boltzmannverteilung gewichtet. Dies spiegelt sich in der Kovarianz $\hbar K_1(t)$ der Gaußschen Rauschkraft $\xi(t)$ wider:

$$\langle \xi(t') \xi(t'') \rangle_\xi = \hbar K_1(t' - t'') . \quad (2.25)$$

Dabei wird im Sinne eines stochastischen Prozesses gemittelt. Die Kovarianz hat klassisch die Gestalt

$$\hbar K_1^{(\text{kl})}(t) = \frac{2}{\beta\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) . \quad (2.26)$$

Dies läßt sich leicht anhand der Boltzmannverteilung der Energie $\frac{1}{2} m_i \omega_i |A_i|^2$ und der Unbestimmtheit der Phase eines jeden harmonischen Oszillators nachrechnen. Bei tiefen Temperaturen macht es sich bemerkbar, daß die Oszillatoren ein diskretes Anregungsspektrum haben². Die Kovarianz ist dann durch

$$\hbar K_1^{(\text{qm})}(t) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) \cos(\omega t) \quad (2.27)$$

gegeben. Benutzt man (2.27) für die Langevingleichung (2.1), so erhält man eine quasiklassische Langevingleichung [68, 72, 73]. Nach dem Wiener–Khinchine–Theorem [73] ergibt die Cosinustransformierte

$$\hbar K_1(\omega) = \int_0^\infty dt \langle \xi(t) \xi(0) \rangle_\xi \cos(\omega t) \quad (2.28)$$

²Dies erinnert an die Debyetheorie zur Wärmekapazität in Festkörpern.

von $\hbar K_1(t)$ das Spektrum der Rauschkraft $\xi(t)$. Dieses steht somit über (2.21) durch

$$K_1(\omega) = J(\omega) \coth(\hbar\beta\omega/2) = \omega\eta'(\omega) \coth(\hbar\beta\omega/2) \quad (2.29)$$

mit dem Realteil von $\eta(\omega)$ in Beziehung. Dies ist das zweite Fluktuation–Dissipations–Theorem (FDT). Es verknüpft den Dämpfungskern, der die Dissipation vermittelt, mit dem Spektrum der Rauschkraft, die zu den stochastischen Fluktuationen führt. Für ohmsche spektrale Dichten lautet das FDT

$$\hbar K_1(\omega) = \hbar\omega\eta \coth(\hbar\beta\omega/2) . \quad (2.30)$$

Im klassischen Limes wird die Kovarianz im ohmschen Fall mit

$$\hbar K_1(\omega) = \frac{2\eta}{\beta} \quad (2.31)$$

frequenzunabhängig.

Mit dem FDT (2.29) zeigt sich ganz allgemein, daß Kovarianz und Dämpfungskern keine unabhängigen Größen sind. Darüberhinaus setzen sich $K_1(t)$ und $K_2(t)$ als Real- und Imaginärteil zu einer analytischen Funktion

$$K(t) = K_1(t) + iK_2(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right] \quad (2.32)$$

zusammen. $K(t)$ ist auf dem Streifen $-\hbar\beta < \text{Im } t < 0$ analytisch fortsetzbar. Dazu definieren wir

$$L(\tau) = K(-i\tau) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\cosh[\hbar\beta\omega/2 - \omega\tau]}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} . \quad (2.33)$$

An diesem Ausdruck erkennt man, daß $L(\tau)$ für $0 < \tau < \hbar\beta$

$$L(\tau) = L(\hbar\beta - \tau) \quad (2.34)$$

erfüllt und für $K(t)$

$$K(t - i\tau) = K(-t + i\tau - i\hbar\beta) = K^*(-t - i\tau) \quad (2.35)$$

gilt. Letztere Beziehung hat großen beweistechnischen Nutzen. $K(t)$ und $L(\tau)$ werden im allgemeinen über den Streifen $0 < \tau < \hbar\beta$ hinaus periodisch fortgesetzt, so daß eine Fourierreihendarstellung

$$L(\tau) = \frac{2}{\hbar\beta\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \omega \frac{\exp(i\nu_n\tau)}{\nu_n^2 + \omega^2} \quad (2.36)$$

mit den Matsubarafrequenzen

$$\nu_n = 2\pi n/\hbar\beta \quad (2.37)$$

durchführbar ist. Die Größen $K(t)$ und $L(t)$ werden auch bei der Influenzfunktionalformulierung der dissipativen Quantenmechanik auftreten.

2.3 Lineare Antworttheorie

Größen wie $\tilde{K}(t)$ aus (2.17) und $\eta(t)$ aus (2.19) werden im folgenden bei der Formulierung der Theorie ebenso wie bei der Repräsentation der Ergebnisse stetig wiederkehren. Den geeigneten Rahmen, diese Größen in einen weiteren physikalischen Zusammenhang zu stellen, bildet die lineare Antworttheorie, auch Green–Kubo–Formalismus genannt [56]–[63]. Sie beschreibt die Antwort eines quantenmechanischen Systems, welches sich anfänglich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, auf externe Felder $F(t)$. Dies entspricht der üblichen experimentellen Situation, in der die Reaktion einer Probe auf einen wohldefinierten äußeren Einfluß hin untersucht wird. Dabei befindet sich die Probe häufig zu Beginn im thermodynamischen Gleichgewicht. Aus diesem heraus wird entweder direkt ihre Antwort auf die vorgegebene experimentelle Situation hin untersucht oder eine Präparation vorgenommen, die wohldefiniert ist, in der sich das System jedoch nicht mehr im Gleichgewicht befindet. Kann im letzteren Fall die Präparation ebenfalls durch das Wirken eines (hinreichend schwachen) äußeren Feldes oder durch die Messung einer Observablen beschrieben werden, so ist auch hier die lineare Antworttheorie anwendbar. Sie liefert neben Vorhersagen über das dynamische Verhalten der Observablen auch Aussagen über daraus folgende Gleichgewichtseigenschaften des untersuchten Systems. Zur Klasse der mit diesem Formalismus beschreibbaren Experimente gehören etwa Relaxationsexperimente wie Spinrelaxationsmessungen (zeitaufgelöste Spektroskopie) und Neutronenstreuung (ortsaufgelöste Spektroskopie).

2.3.1 Die Antwortfunktion

Wir entwickeln nun die grundlegenden Zusammenhänge und klammern dabei Vieltelchenaspekte aus, die ebenfalls im Rahmen dieser Theorie behandelt werden können.

Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist der Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ext}} . \quad (2.38)$$

Für das in dieser Arbeit behandelte Problem ist die Formulierung interessant, in der das externe Feld zu einem Zeitpunkt t_0 eingeschaltet wird und linear an einen Operator \hat{B} koppelt:

$$\hat{H}_{\text{ext}} = -F(t)\hat{B}\Theta(t - t_0) . \quad (2.39)$$

Gesucht ist die Entwicklung von Erwartungswerten

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})}{\text{Tr} \hat{\rho}} \quad (2.40)$$

in linearer Ordnung in $F(t)$. Die Dichtematrix $\hat{\rho}$ ist für Zeiten $t < t_0$ durch die kanonisch Dichtematrix

$$\hat{\rho}_0 = \exp(-\beta \hat{H}_0) \quad (2.41)$$

gegeben; ihre Zeitentwicklung beschreibt die von Neumann–Gleichung. Löst man sie in linearer Ordnung in $F(t)$, so erhält man³

$$\langle \hat{A}(t) \rangle - \langle \hat{A}(t_0) \rangle = \int_{t_0}^t dt' F(t') \chi_{AB}(t - t') \quad (2.42)$$

mit der Suszeptibilität oder Antwortfunktion

$$\chi_{AB}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_- \rangle_{\beta} \Theta(t) . \quad (2.43)$$

In der letzten Formel sind die Operatoren im Wechselwirkungsbild zu nehmen. Ihre Zeitentwicklung wird also durch \hat{H}_0 bestimmt. Der Erwartungswert wird mit $\hat{\rho}_0$ gebildet und ist somit ebenfalls nur von \hat{H}_0 abhängig. Daher wird die Antwort des Systems auf das externe Feld $F(t)$ in linearer Ordnung nur durch die Eigenschaften des ungestörten Systems im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt. Die Θ –Funktion sichert die Kausalität der Auswirkung des Feldes $F(t)$ auf die Zeitentwicklung der Erwartungswerte. Durch Fouriertransformation erhält man die dynamische Suszeptibilität

$$\chi_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{AB}(t) . \quad (2.44)$$

Da der Kommutator zweier hermitescher Matrizen antihermitesch ist, ist $\chi(t)$ reell und somit

$$\chi(\omega) = \chi^*(-\omega) . \quad (2.45)$$

Aufgrund der Kausalität der retardierten Antwortfunktion sind ihr Real- und Imaginärteil nicht unabhängig, sondern durch die Kramers–Kronig–Beziehungen

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' ; \quad (2.46)$$

$$\chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (2.47)$$

miteinander verknüpft. Mit Hilfe der von Neumannschen Bewegungsgleichung für die Operatoren im Wechselwirkungsbild erhält man im Frequenzraum die Bewegungsgleichung

$$\omega \chi_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \langle [\hat{A}(0), \hat{B}(0)]_- \rangle_{\beta} + \frac{1}{\hbar} \chi_{[A,H]_-,B}(\omega) . \quad (2.48)$$

³Manchmal wird hier im Zusammenhang mit Gl. (2.39) ein Minuszeichen eingeführt; wir wählen die Form, in der die Suszeptibilität für lineare Systeme mit der klassischen Greenschen Funktion identisch ist.

Dabei kommen die höheren Greenschen Funktionen $\chi_{[A,H]_-,B}$ ins Spiel, so daß man es mit einer Hierarchie von Bewegungsgleichungen zu tun hat. Im allgemeinen ist eine exakte Lösung der Gleichungen nicht möglich. Bei dem von uns behandelten Problemkreis verhindert dies die Anwesenheit eines Potentials. Die klassischen Bewegungsgleichungen werden dann nichtlinear. Somit gilt nicht mehr das Superpositionsprinzip. Die Antwort des Systems wird von den Anfangsbedingungen abhängig. Daher macht man an einer geeigneten Stelle in der Hierarchie eine Faktorisierungsannahme

$$\chi_{[A,H]_-,B}(\omega) = \chi_{A,B}(\omega) \Sigma(\omega) \quad (2.49)$$

mit der dadurch definierten Selbstenergie $\Sigma(\omega)$. Daraus folgt die näherungsweise gültige Lösung

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{\langle [\hat{A}(0), \hat{B}(0)]_- \rangle_\beta}{\Sigma(\omega) - \hbar\omega}. \quad (2.50)$$

2.3.2 Das Fluktuation–Dissipations–Theorem

Als nächstes führen wir die nichtsymmetrisierte Zweizeiten–Korrelationsfunktion

$$K_{AB}(t) = \langle \hat{A}(t) \hat{B}(0) \rangle_\beta \quad (2.51)$$

sowie die symmetrisierte Zweizeiten–Korrelationsfunktion

$$S_{AB}(t) = \frac{1}{2} \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_+ \rangle_\beta = \frac{1}{2} (K_{AB}(t) + K_{BA}(-t)) \quad (2.52)$$

ein.

Direkt aus der Definition der Ausdrücke durch

$$\langle \hat{A}(t) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\hat{A}(t) \exp(-\beta \hat{H}_0)] \quad (2.53)$$

mit der Zustandsumme Z erhält man unter Benutzung der zyklischen Vertauschbarkeit unter der Spur

$$K_{AB}(t - i\hbar\beta) = \langle \hat{A}(t - i\hbar\beta) \hat{B}(0) \rangle_\beta = \langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle_\beta = K_{BA}(-t) \quad (2.54)$$

und somit nach Fouriertransformation

$$K_{AB}(\omega) \exp(-\hbar\beta\omega) = K_{BA}(-\omega). \quad (2.55)$$

Damit folgt unter Beachtung, daß $\chi_{AB}(t)$ reell ist und für $t < 0$ verschwindet, daß die Fouriertransformierten von $K_{AB}(t)$ und $S_{AB}(t)$ mit dem Imaginärteil der

dynamischen Suszeptibilität verknüpft sind:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\chi_{AB}(t) + \chi_{AB}(-t)) &= \frac{i}{2\hbar}(K_{AB}(t) - K_{BA}(-t)); \\ \frac{1}{2i}(\chi_{AB}(\omega) + \chi_{AB}(-\omega)) &= \frac{1}{2i}(\chi_{AB}(\omega) - \chi_{AB}^*(\omega)) = \chi_{AB}''(\omega) \\ &= \frac{1}{2\hbar}K_{AB}(\omega)(1 - \exp(-\hbar\beta\omega)).\end{aligned}\quad (2.56)$$

Somit erhält man die Formeln

$$K_{AB}(\omega) = \frac{2\hbar}{1 - \exp(-\hbar\beta\omega)} \chi_{AB}''(\omega); \quad (2.57)$$

$$S_{AB}(\omega) = \hbar \coth(\hbar\beta\omega/2) \chi_{AB}''(\omega). \quad (2.58)$$

Diese Beziehungen sind das erste Fluktuations–Dissipations–Theorem [74]. Es besagt, daß die Antwort des Systems auf schwache äußere Kräfte mit den Fluktuationen im Gleichgewicht verknüpft ist. In einer anderen Sprechweise bedeutet dies, daß die Relaxationsprozesse, die das Teilchen nach einer kleinen thermischen Fluktuation wieder ins Gleichgewicht zurücktreiben, auf den gleichen Mechanismen beruhen wie die Relaxation in Folge der Wirkung einer von außen eingebrachten schwachen Kraft. Man erkennt mit (2.45), daß $S(\omega)$ eine gerade Funktion ist.

Die Fluktuationen im thermischen Gleichgewicht werden durch

$$\begin{aligned}C(t) &= \frac{1}{4} \langle [\hat{A}(t) - \hat{A}(0), \hat{B}(t) - \hat{B}(0)]_+ \rangle_\beta \\ &= \frac{1}{2}(S(0) - S(t))\end{aligned}\quad (2.59)$$

beschrieben. Das FDT liefert

$$C(t) = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \chi''(\omega) \coth(\hbar\beta\omega/2) [1 - \cos(\omega t)]. \quad (2.60)$$

2.3.3 Anwendung auf das Caldeira–Leggett–Modell

Im Rahmen des Green–Kubo–Formalismus befindet sich das System zu Beginn im thermodynamischen Gleichgewicht; anschließend wird es aber von der Umgebung abgekoppelt. Dies spiegelt sich in der Tatsache wider, daß die Dynamik allein durch den Systemhamiltonian \hat{H}_0 (2.38) bestimmt wird. Sollen dissipative Effekte in die Beschreibung mit einbezogen werden, so muß das Bad zum System hinzugenommen werden. Im folgenden wollen wir daher den Formalismus der linearen Antworttheorie auf das durch den Caldeira–Leggett–Hamiltonian (2.4) beschriebene System eines Teilchens mit Kopplung an ein Wärmebad anwenden.

Suszeptibilität und Korrelationsfunktionen

Die äußere Kraft $F(t)$ koppelt an den Ortsoperator \hat{q} des Teilchens und wird zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltet. Die Antwort des Teilchens bezüglich seines Ortserwartungswertes $\langle \hat{q}(t) \rangle$ wird durch die Suszeptibilität

$$\chi_{q,q}^T(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{q}(t), \hat{q}(0)]_- \rangle_\beta \Theta(t) \quad (2.61)$$

vermittelt. Die Bewegungsgleichungen lauten bis zur uns interessierenden Stufe der Hierarchie

$$\begin{aligned} \omega \chi_{q,q} &= \frac{i}{m} \chi_{p,q} ; \\ \omega \chi_{p,q} &= i + \frac{1}{\hbar} \chi_{[p,V],q} + i \sum_i C_i \chi_{x_i,q} - i \sum_i \frac{C_i^2}{m\omega_i^2} \chi_{q,q} ; \\ \omega \chi_{x_i,q} &= \frac{i}{m} \chi_{p_i,q} ; \\ \omega \chi_{p_i,q} &= -im\omega_i^2 \chi_{x_i,q} + iC_i \chi_{q,q} . \end{aligned} \quad (2.62)$$

Dieses Gleichungssystem muß nur an einer Stelle faktorisiert werden. Wir setzen⁴

$$\frac{1}{\hbar} \chi_{[p,V],q} = -i \chi_{V'(q),q} = \frac{\Sigma(\omega)}{\omega} \chi_{p,q} = \frac{m}{i} \Sigma(\omega) \chi_{q,q} \quad (2.63)$$

oder auch

$$\chi_{V'(q),q} = m \Sigma(\omega) \chi_{q,q} . \quad (2.64)$$

Die dynamische Suszeptibilität lautet dann

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m \Sigma(\omega) - m\omega^2 - \tilde{K}(\omega)} . \quad (2.65)$$

$\tilde{K}(\omega)$ ist durch (2.16) gegeben. Die Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ repräsentiert dabei den Beitrag des Potentials. Mit $\text{Im } \tilde{K}(\omega) = \omega \eta'(\omega) = J(\omega)$ ergibt sich aus dem obigen Ausdruck

$$\chi''(\omega) = (J(\omega) - m \Sigma''(\omega)) |\chi(\omega)|^2 . \quad (2.66)$$

Für Systeme mit symmetrischer Selbstenergie $\Sigma(\omega) = \Sigma(-\omega)$ und insbesondere für das freie Brownsche Teilchen, bei dem sie verschwindet, erhält man somit

$$\chi''(\omega) = J(\omega) |\chi(\omega)|^2 . \quad (2.67)$$

Mit dieser Beziehung lassen sich über das FDT (2.58) die Kovarianz $K_1(t)$ (2.25) der Gaußschen Rauschkraft und $S(t)$ aus (2.52) in Verbindung bringen. Es ergibt sich

$$S(t) = \hbar \int_0^\infty dt' \int_0^\infty dt'' \chi(t') \chi(t'') K_1(t + t' - t'') . \quad (2.68)$$

⁴Diese Definition der Selbstenergie unterscheidet sich ein wenig von der oben in (2.49) vorgenommenen.

Es folgt nun aus Gl. (2.45), daß der in t ungerade Teil von $\chi(t)$ durch $\chi''(\omega)$ gegeben wird. Aus ihm kann man aber wegen der Kausalität $\chi(t)$ vollständig zurückgewinnen:

$$\begin{aligned}\chi(t) = \Theta(t)(\chi(t) - \chi(-t)) &= \frac{1}{\pi}\Theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \chi''(\omega) \sin(\omega t) \\ &= \frac{2}{\pi}\Theta(t) \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) |\chi(\omega)|^2 \sin(\omega t) .\end{aligned}\quad (2.69)$$

Dies ist eine den Kramers–Kronig–Relationen (2.46) augenscheinlich äquivalente Aussage. Zu ihnen gelangt man durch Fouriertransformation und Benutzung der Plemelj'schen Beziehung

$$\frac{1}{\omega + i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega) \quad (2.70)$$

zurück. Mit (2.22) und unter erneuter Nutzung des FDT (2.57) erhält man den Zusammenhang

$$\chi(t) = 2\Theta(t) \int_0^{\infty} dt' \int_0^{\infty} dt'' \chi(t')\chi(t'')K_2(t + t' - t'') \quad (2.71)$$

sowie für die Größe

$$R(t) = S(t) + \frac{i\hbar}{2}(\chi(t) + \chi(-t)) = S(t) + iA(t) \quad (2.72)$$

mit

$$\begin{aligned}R(t) &= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \chi''(\omega) \frac{\cosh[\hbar\beta\omega/2 - i\omega t]}{\sinh[\hbar\beta\omega/2]} \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) |\chi(\omega)|^2 \frac{\cosh[\hbar\beta\omega/2 - i\omega t]}{\sinh[\hbar\beta\omega/2]}\end{aligned}\quad (2.73)$$

die Beziehung

$$R(t) = \hbar \int_0^{\infty} dt' \int_0^{\infty} dt'' \chi(t')\chi(t'')K(t + t' - t'') . \quad (2.74)$$

Man beachte, daß wir bei der Definition von $R(t)$ den Imaginärteil genauso behandelt haben, wie wir es schon beim Übergang von $\tilde{K}(t)$ nach $K_2(t)$ taten.

Der Übergang von $S(t)$ nach $C(t)$ führt auf die Größe

$$\begin{aligned}\tilde{R}(t) &= R(0) - R(t) = C(t) + iA(t) \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) |\chi(\omega)|^2 \frac{\cosh[\hbar\beta\omega/2] - \cosh[\hbar\beta\omega/2 - i\omega t]}{\sinh[\hbar\beta\omega/2]} .\end{aligned}\quad (2.75)$$

Die Größe $K(t)$, welche wir in Gl. (2.32) einführt, erhält im Rahmen der linearen Antworttheorie ihren physikalischen Hintergrund. Die Langevingleichung (2.1) kann auch als Operatorgleichung im Heisenbergbild aufgefaßt werden [69, 73], [75]–[77]. Da das Bad durch harmonische Oszillatoren beschrieben wird, ändert die Gleichung nicht ihre Gestalt. Wir betrachten die Zweizeiten–Korrelationsfunktion

$$\langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(0) \rangle_{\beta} = \sum_{i,j} C_i C_j \langle \hat{x}_i(t)\hat{x}_j(t) \rangle \quad (2.76)$$

der durch das Bad auf das Teilchen wirkenden Operatorkraft

$$\hat{\xi}(t) = \sum_i C_i \hat{x}_i(t) . \quad (2.77)$$

Dazu benötigen wir die Ortsautokorrelationsfunktionen

$$K_{ij}(t) = \langle \hat{x}_i(t)\hat{x}_j(0) \rangle_{\beta} = \delta_{ij} \langle \hat{x}_i(t)\hat{x}_i(0) \rangle_{\beta} =: \delta_{ij} K_i(t) \quad (2.78)$$

der Badoszillatoren. Die Korrelationen zwischen verschiedenen Badoszillatoren verschwinden, da diese entkoppelt sind und ihre relative Phasenlage nicht festgelegt ist. Die dynamische Suszeptibilität des i . Badoszillators ergibt sich zu

$$\chi_{x_i, x_i}(\omega) = \frac{1}{m_i} \frac{1}{\omega_i^2 - \omega^2 - i \text{sign}(\omega) 0^+} . \quad (2.79)$$

Die Kausalität ist durch die angedeutete Verschiebung der Pole gewährleistet. $K_i(t)$ nimmt dann die Form einer bosonischen Greenschen Funktion an und lautet unter Benutzung des FDT (2.57)

$$K_i(t) = \langle \hat{x}_i(t)\hat{x}_i(0) \rangle = \frac{\hbar}{2m_i\omega_i} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega_i/2 - i\omega_i t)}{\sinh(\hbar\beta\omega_i)} . \quad (2.80)$$

Damit ergibt sich gerade

$$\begin{aligned} \langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(0) \rangle_{\beta} &= \hbar \sum_i \frac{C_i^2}{2m_i\omega_i} \frac{\cosh(\hbar\beta\omega_i/2 - i\omega_i t)}{\sinh(\hbar\beta\omega_i)} \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \right] \\ &= \hbar K(t) . \end{aligned} \quad (2.81)$$

Diese Beziehung steht in Analogie zu Gl. (2.25), in der jedoch statt eines Erwartungswertes eine Ensemblemittelung über die C–Zahl–Rauschkraft $\xi(t)$ durchgeführt wird.

Die Einsteinrelation

Für die Fluktuationen der Ortskoordinate haben wir in (2.60) und (2.67)

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{2} \langle (\hat{q}(t) - \hat{q}(0))^2 \rangle_\beta \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) |\chi(\omega)|^2 \coth(\hbar\beta\omega/2) [1 - \cos(\omega t)] \end{aligned} \quad (2.82)$$

erhalten. Für große Zeiten folgt aus dem FDT (2.60) und mit

$$\frac{2}{\hbar\beta\omega} < \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) < 1 + \frac{2}{\hbar\beta\omega} \quad (2.83)$$

die Beziehung⁵

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\chi(t)}{\dot{C}(t)} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\chi(\omega)}{i\omega C(\omega)} = \beta. \quad (2.84)$$

Sie liefert die Einsteinrelation

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{F \rightarrow 0} \frac{2}{F} \frac{\langle \hat{q}(t, F) \rangle}{\langle \hat{q}^2(t, 0) \rangle} = \beta, \quad (2.85)$$

eine Beziehung zwischen dem linearisierten ersten Moment und dem zweiten Moment im thermodynamischen Gleichgewicht, sofern beide Größen definiert sind. In einer anderen Formulierung verbindet sie die Mobilität

$$\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} \chi(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \dot{\hat{q}}(t) \rangle}{F} \quad (2.86)$$

und die Diffusionskonstante

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \dot{C}(t) \quad (2.87)$$

nach

$$\mu_l = \mu(F = 0) = \beta D. \quad (2.88)$$

Es läßt sich auch eine dynamische lineare Mobilität definieren. Nimmt man eine oszillatorische Kraft $F(t)$ an, so erhält man

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \dot{\hat{q}}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' F_0 \exp(-i\omega t) \chi_{\dot{q}\dot{q}}(t') = F_0 \mu_l(\omega). \quad (2.89)$$

Mit (2.43) ergibt sich so für die lineare dynamische Mobilität

$$\mu_l(\omega) = \chi_{\dot{q}\dot{q}}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \langle [\dot{\hat{q}}, \hat{q}]_- \rangle_{\beta, \omega} = \frac{\omega}{\hbar} \langle [\hat{q}, \hat{q}]_- \rangle_{\beta, \omega}. \quad (2.90)$$

Die statische Mobilität ergibt sich zu $\mu_l(\omega = 0) = \mu_l$.

⁵Geht man wie in [41] statt von $\dot{C}(t)$ von $C(t)/t$ aus, so erhält man für algebraisches Verhalten $C(t) \sim t^s$ einen zusätzlichen Faktor s .

2.3.4 Behandlung mit der klassischen Antworttheorie

Wir betrachten nun wieder die Langevingleichung (2.1) in ihrer quasiklassischen Form, in der das Frequenzspektrum der Rauschkraft $\xi(t)$ die quantenmechanische Form (2.27) hat. Dabei wollen wir Beziehungen entwickeln, die in direkter Analogie zu denen des Green–Kubo–Formalismus stehen. Diese benötigen wir später, da der Funktionalintegralformalismus eine C–Zahl–Formulierung der Quantenmechanik darstellt, die auf der klassischen Theorie gründet. Die hier erhaltenen Ergebnisse, insbesondere die für das freie Brownsche Teilchen, werden bei der Behandlung der Bewegung im Cosinuspotential zur Anwendung kommen.

Formale Lösung der Langevingleichung

Die Langevingleichung (2.1) kann mit Hilfe der Technik der Greenschen Funktionen gelöst werden. Dabei betrachten wir die Integro–Differentialgleichung ohne Rauschkraft, jedoch mit einer δ –Inhomogenität, die nach Fouriertransformation folgende Gestalt annimmt:

$$-m\omega^2 g(\omega) - \tilde{K}(\omega)g(\omega) + m\Sigma^{(\text{kl})}(\omega)g(\omega) = 1 . \quad (2.91)$$

Die hierbei eingeführte klassische Selbstenergie

$$\Sigma^{(\text{kl})}(\omega) = \frac{\widetilde{V'(g)}(\omega)}{mg(\omega)} \quad (2.92)$$

ist im allgemeinen nicht mit der quantenmechanischen Selbstenergie (2.64) identisch. Auflösen nach der Greenschen Funktion $g(\omega)$ ergibt

$$g(\omega) = \frac{1}{\Sigma(\omega) - m\omega^2 - \tilde{K}(\omega)} . \quad (2.93)$$

Die Lösung der Langevingleichung lautet

$$q(t) = q_i(t) + \int_0^t g(t-t') \xi(t') dt' . \quad (2.94)$$

In ihrem homogenen Anteil $q_i(t)$ stecken die Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = 0$. Neben der Antwortfunktion $g(t)$ interessiert uns noch die symmetrisierte Gleichgewichtskorrelationsfunktion $C^{(\text{kl})}(t)$:

$$C^{(\text{kl})}(t) = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \langle (q(t+t') - q(t'))^2 \rangle_\xi . \quad (2.95)$$

Dabei benutzt man die Lösungen (2.94) und wartet, bis das Teilchen mit dem Bad relaxiert ist. Im zeitlichen Abstand t nimmt man dann zwei Ortsmessungen vor. Alternativ kann man auch den Präparationszeitpunkt nach $-\infty$ verschieben und bei endlichen Zeiten messen. Auch $C^{(\text{kl})}(t)$ ist im allgemeinen nicht mit der quantenmechanischen Größe $C(t)$ aus (2.82) identisch.

Das freie Brownsche Teilchen

Befindet sich das Teilchen nicht in einem Potential, ist es also abgesehen von der Existenz des Bades frei, so beruht seine Bewegung allein auf den fluktuierenden Kräften des Bades und der äußeren Kraft F . Es handelt sich dann um das freie Brownsche Teilchen. Seine Selbstenergie verschwindet. Die Greensche Funktion

$$g(t) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{m\omega^2 + \tilde{K}(\omega)} \exp(-i\omega t) \quad (2.96)$$

ist dann mit der Suszeptibilität $\chi(t)$ (2.61) identisch. Für sie gilt also auch die Beziehung (2.69), die nun

$$g(t) = \frac{2}{\pi} \Theta(t) \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) |g(\omega)|^2 \sin(\omega t) \quad (2.97)$$

lautet. Für strikt ohmsche Dissipation (2.7) ist

$$g(\omega) = -\frac{1}{m\omega^2 + i\omega\eta} \quad (2.98)$$

und

$$g(t) = \Theta(t) \frac{1 - \exp(-\gamma t)}{\eta} \quad (2.99)$$

mit $\gamma = \eta/m$. Da das betrachtete System im uns interessierenden Bereich $0 < s < 2$ ergodisch ist, entspricht die Verbindung von Langzeitlimites und stochastischer Mittelung in Gl. (2.95) genau dem thermischen Mittelwert in (2.82). Da zudem die Operatoren im Heisenbergbild im Falle des Brownschen Teilchen gerade den klassischen Bewegungsgleichungen folgen, ist $C^{(\text{kl})}(t)$ mit $C(t)$ identisch. Somit überträgt sich (2.82) auch auf $C^{(\text{kl})}(t)$:

$$C^{(\text{kl})}(t) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) |g(\omega)|^2 \coth(\hbar\beta\omega/2) [1 - \cos(\omega t)] . \quad (2.100)$$

Langzeitverhalten und Massenrenormierung

Wir betrachten nun die Suszeptibilität und die Gleichgewichtskorrelationsfunktion des Brownschen Teilchens für große Zeiten.

Der Hamiltonian (2.4) ist translationsinvariant, wenn neben dem Teilchen auch das Bad einer Translation unterworfen wird. Das Gesamtsystem hat die Masse⁶

$$m_{\text{ren}} = m + \sum_i m_i = m + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3} . \quad (2.101)$$

⁶Man benutzt dazu die Parameterisierung (2.9).

Es ist nun üblich, in der spektralen Dichte $J(\omega)$ den hochfrequenten Anteil abzuspalten. Dazu schreibt man

$$J(\omega) = J_{\text{nf}}(\omega) + J_{\text{hf}}(\omega) . \quad (2.102)$$

Der niederfrequente Anteil soll für $\omega \rightarrow 0$ gerade die Form

$$J_{\text{nf}}(\omega) = \eta_s \omega^s \quad (2.103)$$

haben. Der hochfrequente Anteil beschreibt das Abklingen der spektralen Dichte für große Frequenzen, wie es in jedem realen System auftritt. Das Integral (2.101) konvergiert über $J_{\text{hf}}(\omega)$. Für $s > 2$ konvergiert es auch über den niederfrequenten Anteil. Für große Zeiten kann dann das Bad der Bewegung des Teilchens folgen. Sein einziger Effekt ist daher eine Massenrenormierung. Das Teilchen wird beschleunigt und zieht das Bad hinter sich her; es gilt somit $\langle \hat{q}(t) \rangle \sim t^2$. Für $0 < s < 2$ divergiert das Integral (2.101); das Bad hat somit eine unendlich große Masse. Dies spiegelt sich im Verhalten von $g(t)$ und $C(t)$ für große Zeiten wider. Es ergibt sich aus (2.65) mit $\tilde{K}(\omega) \sim \omega^s$ für $\omega \rightarrow 0$ und der Einsteinrelation (2.84) zu

$$\begin{aligned} g(t) &= \frac{\sin(s\pi/2)}{\eta_s \Gamma(s)} t^{s-1} && \text{für } 0 < s < 2 ; \\ g(t) &= \frac{\pi}{2\eta_2} \frac{t}{\ln(\omega_c t)} && \text{für } s = 2 ; \\ g(t) &= \frac{t}{m_{\text{ren}}} && \text{für } s > 2 \end{aligned} \quad (2.104)$$

sowie

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{\sin(s\pi/2)}{\beta \eta_s \Gamma(s+1)} t^s && \text{für } 0 < s < 2 ; \\ C(t) &= \frac{\pi}{4\eta_2 \beta} \frac{t^2}{\ln(\omega_c t)} && \text{für } s = 2 ; \\ C(t) &= \frac{t^2}{2m_{\text{ren}}} && \text{für } s > 2 . \end{aligned} \quad (2.105)$$

Hierbei ist ω_c eine durch die Aufspaltung von $J(\omega)$ ins Spiel gekommene Abschneidefrequenz, während m_{ren} in (2.101) gegeben ist.

2.4 Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik

Der Inhalt dieses Abschnittes ist eine kurze Einführung in die Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik. Sie wurde von R. P. Feynman in den 40er Jahren entwickelt [78, 79] und hat anschließend Anwendungen in den verschiedensten Gebieten der Quantenmechanik und -statistik gefunden. Eine grundlegende

Einführung bieten die Lehrbücher [79]–[83]. Wir gehen insbesondere auf die Influenzfunktionaltechnik von Feynman und Vernon [1] ein, in der eine effektive Beschreibung eines Teilsystems geliefert wird, welches an eine Umgebung gekoppelt ist. Für das Caldeira–Leggett–Modell nimmt das Influenzfunktional eine spezifische Form an. Sie bildet den Ausgangspunkt für die Rechnungen dieser Arbeit.

2.4.1 Das Pfadintegral

Die Zeitentwicklung eines Zustandes im Hilbertraum wird im Schrödingerbild durch den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t_f, t_i)$ vermittelt. Mit ihm ist der Zustand des Systems zum Zeitpunkt t_f durch

$$|\psi(t_f)\rangle = \hat{U}(t_f, t_i)|\psi(t_i)\rangle \quad (2.106)$$

gegeben. Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein und integriert die daraus resultierende Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_i)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_i) \quad (2.107)$$

mit der Randbedingung

$$\hat{U}(t_i, t_i) = \hat{\mathbf{1}} \quad (2.108)$$

formal, so lautet das Ergebnis

$$\hat{U}(t_f, t_i) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} ds \hat{H}(s) \right\} . \quad (2.109)$$

T ist dabei der Zeitordnungsoperator. Für einen zeitunabhängigen Hamiltonian erhält man

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \times (t_f - t_i) \right\} . \quad (2.110)$$

Die Spektraldarstellung des Zeitentwicklungsoperators in der Basis der Eigenfunktionen von \hat{H} lautet

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n (t_f - t_i) \right\} . \quad (2.111)$$

Direkt aus der Definitionsgleichung (2.106) folgt die Eigenschaft

$$\hat{U}(t_f, t') \hat{U}(t', t_i) = \hat{U}(t_f, t_i) \quad (2.112)$$

mit $t_i < t' < t_f$. Damit bilden die Zeitentwicklungsoperatoren ein Halbgruppe.

Das Feynmansche Pfadintegral gibt die Matrixelemente

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | \hat{U}(t_f, t_i) | x_i \rangle \quad (2.113)$$

des Zeitentwicklungsoperators in der Ortsdarstellung an. Die Wellenfunktion zum Zeitpunkt t_f ist dann mit der zur Zeit t_i durch

$$\psi(x_f, t_f) = \int dx_i K(x_f, t_f; x_i, t_i) \psi(x_i, t_i) \quad (2.114)$$

verknüpft. $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ nennt man Propagator. Er löst die Schrödingergleichung bezüglich x_f und t_f mit der Anfangsbedingung

$$K(x_f, t_i; x_i, t_i) = \delta(x_f - x_i). \quad (2.115)$$

Ausgangspunkt der folgenden Überlegungen ist ein Hamiltonian der Gestalt

$$H(x, p) = T(p) + V(x) \quad (2.116)$$

sowie der zugehörige Lagrangian

$$L(x, \dot{x}) = T(\dot{x}) - V(x) \quad (2.117)$$

mit der kinetischen Energie

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 \quad (2.118)$$

und dem Potential $V(x)$.

Der Propagator $K(x_f, t_f; x_i, t_i)$ gibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude an, das Teilchen bei (x_f, t_f) zu finden, wenn es bei (x_i, t_i) gestartet ist. Die Ausnutzung der Halbgruppeneigenschaft (2.112) und Zerlegung des Intervalls $t_f - t_i$ in kleine Segmente führt auf

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left\{ \prod_{l=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_l \right\} \prod_{k=1}^N K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \quad (2.119)$$

mit $x_0 = x_i$, $x_N = x_f$, $t_0 = t_i$ und $t_N = t_f$. Mit $N \rightarrow \infty$ und $|t_k - t_{k-1}| \rightarrow 0$ ist für die im Integral auftretenden Kurzzeitpropagatoren die Näherung

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_k}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Delta t_k \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta x_k}{\Delta t_k} \right)^2 - V \left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.120)$$

durchführbar. Dabei steht Δt_k für $t_k - t_{k-1}$ und Δx_k für $x_k - x_{k-1}$. Mit $\frac{t_f - t_i}{N} = \epsilon$ ergibt sich so die diskretisierte Form

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \prod_{l=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_l \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{l=1}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.121)$$

des Pfadintegrals für den Propagator. Im Exponenten des letzten Terms steht ein Riemannsches Integral, das der klassischen Wirkung

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x(t), \dot{x}(t)) \quad (2.122)$$

einer Trajektorie $x(t)$ entspricht, die über die Punkte $\{(x_l, t_l)\}$ führt. Im Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$, $N = \frac{t_f - t_i}{\epsilon} \rightarrow \infty$ entspricht der Integration über die Orte x_l die Summation über alle Trajektorien, die (x_i, t_i) und (x_f, t_f) verbinden. Dies ist in Abbildung (2.1) verdeutlicht.

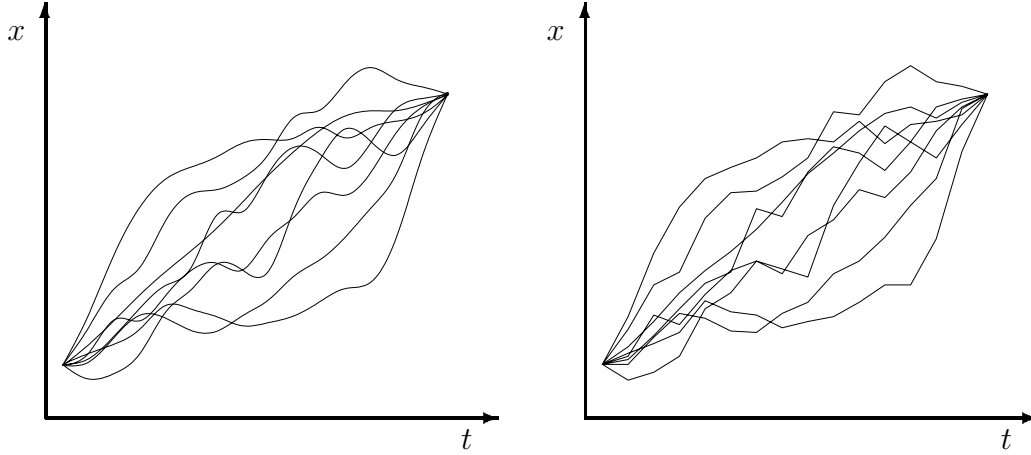


Abbildung 2.1: Einige Pfade im Konfigurationsraum in kontinuierlicher und diskretisierter Fassung

Mit der abkürzenden Schreibweise

$$\int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}x = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \prod_{l=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_l \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \quad (2.123)$$

lautet der Propagator somit

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\}. \quad (2.124)$$

Diesen Ausdruck faßt man als unendlichdimensionales Integral im Funktionenraum auf. Jeder Weg wird dabei mit dem komplexen Maß $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x] \right\}$ gewichtet. Dieser Faktor kann jedoch nicht als Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür aufgefaßt werden, daß das Teilchen tatsächlich diesem Weg gefolgt ist. Trajektorien im Phasenraum haben in der Quantenmechanik keine Bedeutung, da sie gar nicht definiert sind. Das Maß hat immer den Betrag 1. Dafür hat sich die Bezeichnung „Demokratie aller Vergangenheiten“ eingebürgert. Diese Eigenschaft des Maßes

hat jedoch auch zur Folge, daß der obige Ausdruck nicht immer wohldefiniert ist. Führt man hingegen eine Wickrotation $t = -i\tau$ durch, so geht das Maß in die Gaußsche Form

$$\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}S_E[x]\right\} \quad (2.125)$$

mit der positiv definiten euklidischen Wirkung

$$S_E[x] = \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \{T(\dot{x}(\tau)) + V(x(\tau))\} \quad (2.126)$$

über. Dieses Maß schreibt allen diskontinuierlichen (unstetigen) Wegen das Gewicht Null zu. Durch analytische Fortsetzung eines auf diese Art und Weise berechneten Imaginärzeitpropagators erhält man die Realzeitpropagatoren in einer wohldefinierten Form.

Identifiziert man den Parameter τ mit der thermischen Zeit $\hbar\beta$, so erkennt man anhand der Form (2.110) des Zeitentwicklungsoperators, daß der Imaginärzeitpropagator der Ortsdarstellung der thermischen Dichtematrix

$$\rho(x_1, x_2; \beta) = Z^{-1} \langle x_1 | \exp\{-\beta\hat{H}\} | x_2 \rangle \quad (2.127)$$

entspricht. Die Zustandssumme

$$Z = \text{Tr} \exp\{-\beta\hat{H}\} = \int dx \langle x | \exp\{-\beta\hat{H}\} | x \rangle \quad (2.128)$$

ist dabei gerade durch die geschlossenen Wege der Dauer $\hbar\beta$ gegeben. In der Spektraldarstellung nimmt $Z(\beta)$ die Form

$$Z(\beta) = \sum_n \exp\{-\beta E_n\} \quad (2.129)$$

an. Bekanntermaßen ist schon mit Kenntnis der Zustandssumme die gesamte Thermodynamik des Systems gegeben. Insbesondere gelangt man durch analytische Fortsetzung mittels einer inversen Wickrotation und unter Bildung der sogenannten Resolventen

$$G(E) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \int_0^\infty dt' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Et'\right\} = \sum_n \frac{1}{E_n - E} \quad (2.130)$$

zur Kenntnis aller Eigenwerte des Hamiltonians, die sich als die Pole der Resolventen ergeben.

2.4.2 Semiklassische Behandlung von Pfadintegralen

Im Rahmen des Pfadintegralformalismus läßt sich der Übergang zwischen quantenmechanischem und klassischem Regime relativ anschaulich darstellen [81]. Dazu

betrachtet man die Wirkungen benachbarter Wege im Phasenraum. Im allgemeinen wird die oszillierende Phase des Maßes im Pfadintegral dafür sorgen, daß Interferenzeffekte auftreten. Dabei kann es zu destruktiver Interferenz kommen. Der Unterschied zwischen quantenmechanischen und klassischen Systemen besteht im Ausmaß dieser destruktiven Interferenz. Im allgemeinen werden alle Wege, die in einem Streifen mit einer Differenz in der Wirkung von

$$\Delta S \approx \pi \hbar \quad (2.131)$$

liegen, positiv miteinander interferieren. Quantenmechanische Systeme sind somit durch ein Wirkungsfunktional gekennzeichnet, dessen typische Differenz für zwei benachbarte Wege klein ist. Bei klassischen Systemen hingegen ist dies nur für Wege gegeben, die in der Nähe eines stationären Punktes des Wirkungsfunktionals liegen. Diese Punkte sind gerade die Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen. In einer groben Approximation ergibt dies die klassische Näherung

$$K(x, t; x', 0) \sim \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{\text{kl}} \right\} \quad (2.132)$$

des Propagators.

Über diese grobe Form geht man hinaus, wenn man die Gaußschen Fluktuationen um den klassischen Weg herum mitbetrachtet. Im Rahmen dieser semiklassischen Näherung entwickelt man das Wirkungsfunktional gemäß

$$S[x_{\text{kl}} + y] = S[x_{\text{kl}}] + \frac{1}{2} \int_0^t dt \frac{\delta^2 S}{\delta x^2}[x_{\text{kl}}] y^2(t) \quad (2.133)$$

bis zur zweiten Ordnung in den Fluktuationen $y(t)$. Das verbleibende Pfadintegral hängt über Gaußfunktionen von $y(t)$ ab und ist somit im Prinzip durchführbar. Es führt auf die Lösung des Eigenwertproblems des hermiteschen Operators, der der zweiten Funktionalableitung der Wirkung zugeordnet ist [84]. Im einfachsten Fall lautet er

$$\hat{W} = -\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} + V''(x_{\text{kl}}) . \quad (2.134)$$

Entwickelt man $y(t)$ nach den Eigenfunktionen von \hat{W} , so führt dies auf die Berechnung der Determinante des Operators. Berechnet man nun das Verhältnis zweier verschiedener Propagatoren, von denen etwa einer als bekannt vorausgesetzt werden kann, reduziert sich das Problem auf die Berechnung des Verhältnis zweier Determinanten. Dabei findet in der Regel die Formel

$$\frac{\text{Det}[-\partial_t^2 - W(t)]}{\text{Det}[-\partial_t^2 - V(t)]} = \frac{f_W(t_f)}{f_V(t_f)} \quad (2.135)$$

mit

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dt^2} + W(t) \right\} f_W(t) &= 0 ; \\ f_W(t_i) &= 0 ; \\ \dot{f}_W(t_i) &= 1 \end{aligned} \quad (2.136)$$

Verwendung.

Die semiklassische Näherung ist für bilineare Lagrangefunktionen exakt. Für den harmonischen Oszillator erhält man

$$K(x_f, t; x_i, 0) = \exp \left\{ -i\frac{\pi}{4} - i\frac{\pi}{2} \left[\frac{\omega t}{\pi} \right] \right\} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar |\sin(\omega t)|} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{\text{kl}} \right\} \quad (2.137)$$

mit der Gaußschen Stufenfunktion $[x]$. Für den getriebenen harmonischen Oszillator erhält man die gleiche Form; allerdings unterscheiden sich die klassischen Trajektorien, so daß wir einen anderen expliziten Ausdruck für die klassische Wirkung erhalten. In ihm taucht insbesondere die dynamische Suszeptibilität des harmonischen Oszillators auf.

2.4.3 Instantonen

Auch Tunnelvorgänge lassen sich im Rahmen des Pfadintegralformalismus beschreiben [84, 85]. Tatsächlich übertrifft er jeden anderen Formalismus bei der Behandlung dieses Problemkreises. Insbesondere läßt sich auch der Einfluß von Dissipation mit einbeziehen. Damit wollen wir uns aber erst im Rahmen der Diskussion des Tight-Binding-Modells beschäftigen.

Tunnelprozesse werden durch stationäre Lösungen beschrieben, die von einem Minimum des Potentials bei x_1 in ein anderes bei x_2 führen. In Realzeit ist ein solcher Weg klassisch nicht möglich. Geht man dagegen zur Imaginärzeit über, so ist das Potential invertiert, wie man aus (2.126) ersieht. Für $\tau \rightarrow \infty$ hat die klassische Lösung der Bewegungsgleichung, die nun die Maxima miteinander verbindet, die Energie 0. Diese Lösung nennt man Instanton. Die nachstehenden Abbildungen verdeutlichen die Situation für ein quartisches Potential mit degenerierten Minima.

Das hermitesche Eigenwertproblem

$$m\ddot{y}(\tau) - V''(x_{\text{kl}})y(\tau) = Ey(\tau) \quad (2.138)$$

des Operators (2.134), welches bei der Berechnung des semiklassischen Propagators auftritt, besitzt mit der Lösung

$$y_0(\tau) = \dot{x}_{\text{kl}}(\tau) \quad (2.139)$$

eine Eigenfunktion zum Eigenwert 0. Sie ist mit der Translationsinvarianz des Instantons in der Zeit verknüpft. Daher läßt sich die formale Divergenz der reziproken Determinante durch die Integration über die Zentrenzeit des Instantons ersetzen. Die Normierung der Lösung $y_0(\tau)$ führt unter Berücksichtigung der Bewegungsgleichung auf

$$m \int_0^\tau d\tau' \dot{x}_{\text{kl}}^2(\tau') = \int_{x_1}^{x_2} dx V(x) = S_0. \quad (2.140)$$

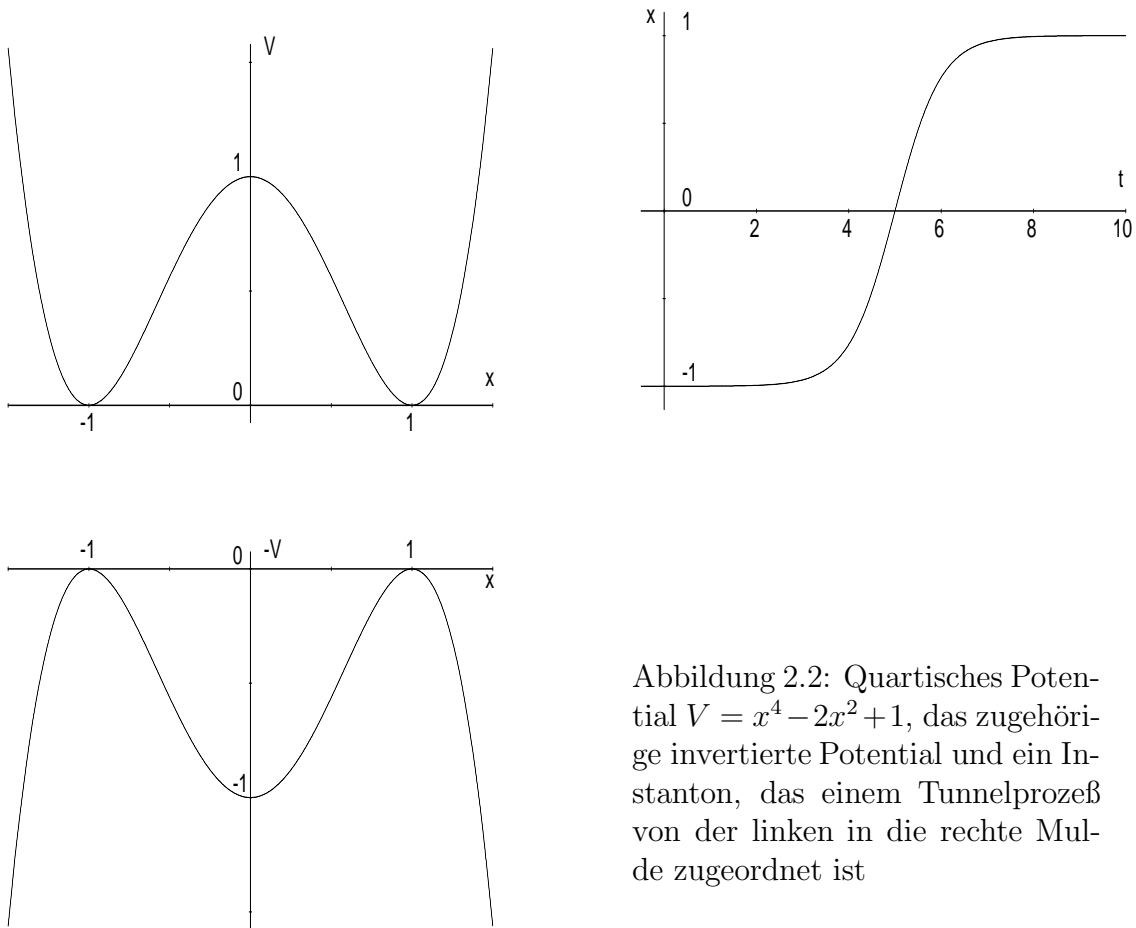


Abbildung 2.2: Quartisches Potential $V = x^4 - 2x^2 + 1$, das zugehörige invertierte Potential und ein Instanton, das einem Tunnelprozeß von der linken in die rechte Mulde zugeordnet ist

Da sich das Teilchen bis auf den Zeitraum, in dem es tunnelt, im Minimum des nichtinvertierten Potentials bewegt, wo $V(x) \approx \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ gilt, führt man

$$\Delta_u = \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\text{Det}[-\partial_\tau^2 + \omega_0^2]}{\text{Det}'[-\partial_\tau^2 + V''(x_{kl})/m]} \right)^{1/2} \quad (2.141)$$

für das Verhältnis der Determinante von \hat{W} unter Aussparung des Eigenwertes 0 zu der des harmonischen Oszillators ein. Letztere ist bekannt. Insgesamt erhält man somit für einen Ein-Instanton-Tunnelprozeß

$$K^1(x_2, \tau; x_1, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \Delta_u \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_0 \right\} \exp \left\{ -\frac{\omega\tau}{2} \right\} \int_0^\tau d\tau' \quad (\tau \rightarrow \infty). \quad (2.142)$$

Dieses Ergebnis läßt sich leicht auf Mehr-Instantonen-Prozesse verallgemeinern. In der folgenden Abbildung ist eine solche Trajektorie aufgezeichnet.

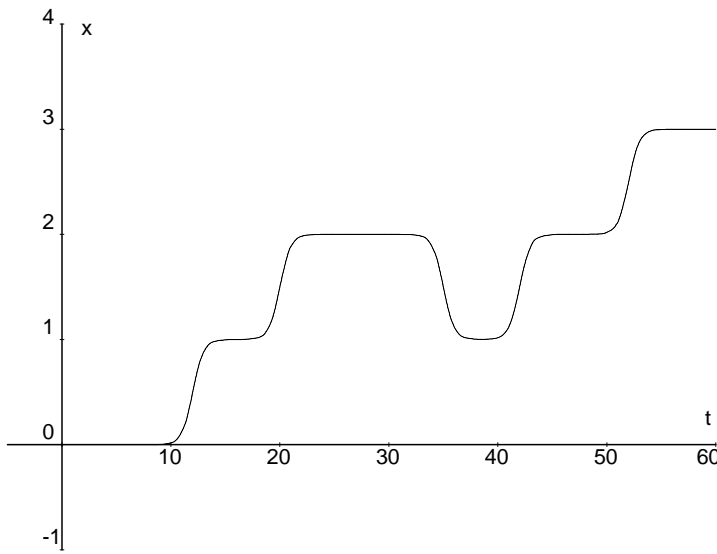


Abbildung 2.3: Eine aus fünf Instantonen zusammengesetzte Instantonkette, die etwa in einem periodischen Gitter von der Mulde 0 in die Mulde 3 führt

Da die Instantonen asymptotisch wie $\exp(\omega_0\tau)$ von ihrem Ausgangspunkt weglaufen und wie $\exp(-\omega_0\tau)$ den Endort erreichen, sind sie zeitlich stark lokalisiert. Unter der Voraussetzung, daß die verschiedenen Instantonen weit voneinander entfernt sind, so daß sie sich nicht gegenseitig beeinflussen, und daß für alle Tunnelprozesse dasselbe Δ_u gilt, faktorisiert der Propagator in die Anteile der einzelnen Instantonen. Dann lautet der gesamte Imaginärzeitpropagator für $(\tau \rightarrow \infty)$

$$K(x_2, \tau; x_1, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sum'_{n,m} \Delta_0^{n+m} \exp\left\{-\frac{\omega\tau}{2}\right\} \int_0^\tau \mathcal{D}_n[\tau] \int_0^\tau \mathcal{D}_m[\tau] \cdot (2.143)$$

n und m bezeichnen die Zahl der Tunnelprozesse nach rechts bzw. links. Die Kombinatorik hängt dabei von der Topologie des Potentials ab, also von Zahl und Lage der Mulden, sowie von der Randbedingung, daß der Weg des Teilchens bei x_1 beginnt und bei x_2 endet. $\int_0^\tau \mathcal{D}_m[\tau]$ steht für die zeitgeordnete Integration

$$\int_0^\tau \mathcal{D}_m[\tau] = \int_0^\tau d\tau_m \int_0^{\tau_m} d\tau_{m-1} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \quad (2.144)$$

über die Tunnelzeiten τ_i . Das Tunnelmatrixelement

$$\Delta_0 = \Delta_u \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} S_0\right\} \quad (2.145)$$

ist direkt mit der Aufspaltung der Grundzustandsenergien verbunden. Es wird bei der Behandlung des Tight-Binding-Modells wieder auftreten.

2.4.4 Das Influenzfunktional

Im folgenden wollen wir den Pfadintegralformalismus auf dissipative Quantensysteme anwenden.

Die zeitliche Entwicklung der Dichtematrix $\rho_{\text{ges}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}'; t)$ des Gesamtsystems aus Bad und Teilchen wird durch den Propagator

$$\begin{aligned} J(q_f, q'_f, \mathbf{x}_f, \mathbf{x}'_f, t; q_i, q'_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_i, 0) \\ = K(q_f, \mathbf{x}_f, t; q_i, \mathbf{x}_i, 0) K^*(q'_f, \mathbf{x}'_f, t; q'_i, \mathbf{x}'_i, 0) \end{aligned} \quad (2.146)$$

vermittelt. Alle Erwartungswerte von Observablen, die sich nur auf das Teilchen beziehen, lassen sich jedoch auch mit der reduzierten Dichtematrix

$$\rho(q, q'; t) = \int d\mathbf{x} \rho_{\text{ges}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}; t) \quad (2.147)$$

bilden. Für sie läßt sich ohne Kenntnis des Anfangszustandes des Bades kein Propagator formulieren. Man hat dagegen

$$\begin{aligned} \rho(q_f, q'_f; t) \\ = \int d\mathbf{x}_f d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i dq_i dq'_i J(q_f, q'_f, \mathbf{x}_f, \mathbf{x}_f, t; q_i, q'_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_i, 0) \rho_{\text{ges}}(q_i, q'_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_i; 0) . \end{aligned} \quad (2.148)$$

Zwei wohldefinierte Anfangszustände sind die thermischen Anfangsbedingungen

$$\rho_{\text{ges}}^{\text{th}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) = Z^{-1} \langle q, \mathbf{x} | \exp\{-\beta \hat{H}\} | q', \mathbf{x}' \rangle \quad (2.149)$$

mit der Zustandssumme

$$Z = \text{Tr} \exp\{-\beta \hat{H}\} \quad (2.150)$$

sowie die faktorisierenden Anfangsbedingungen

$$\rho_{\text{ges}}^{\text{fac}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) = \rho(q, q'; 0) \rho_{\text{Bad}}^{\text{th}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) , \quad (2.151)$$

wobei sich das Bad im thermischen Gleichgewicht befinden soll und durch

$$\rho_{\text{Bad}}^{\text{th}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) = Z_{\text{Bad}}^{-1} \langle \mathbf{x} | \exp\{-\beta \hat{H}_{\text{Bad}}\} | \mathbf{x}' \rangle \quad (2.152)$$

beschrieben wird. Man kann sich auch faktorisierende Anfangsbedingungen mit

$$\rho_{\text{Bad}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) = (Z')^{-1} \int dq \langle q, \mathbf{x} | \exp\{-\beta \hat{H}'_{\text{Bad}}\} | q, \mathbf{x}' \rangle \rho(q, q, 0) \quad (2.153)$$

oder

$$\begin{aligned} \rho_{\text{Bad}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) &= \int dq \rho_{\text{ges}}^{\text{th}}(q, q, \mathbf{x}, \mathbf{x}'; 0) ; \\ \rho(q, q'; 0) &= \int d\mathbf{x} \rho_{\text{ges}}^{\text{th}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}; 0) \end{aligned} \quad (2.154)$$

denken. Auf diese Ansätze werden wir aber nicht eingehen. Während die thermischen Anfangsbedingungen der Situation entsprechen, die die lineare Antworttheorie beschreibt, sind die faktorisierenden Anfangsbedingungen mit einer Präparation des Teilchens zur Zeit t_i verbunden. Die Wahl der Anfangsbedingungen hängt

von der zu beschreibenden experimentellen Situation sowie den gesuchten Größen ab. Für ergodische Systeme ist die Wahl der Anfangsbedingungen im Prinzip frei, wenn nach dem Langzeitverhalten gesucht wird. Dann spielen rechen-technische Erwägungen die Hauptrolle.

Setzt man die thermischen Anfangsbedingungen in den Ausdruck (2.148) ein und drückt auch die Gleichgewichtsdichtematrix als Imaginärzeitpfadintegral aus, so erhält man ein sechsfaches Funktionalintegral der Form

$$\begin{aligned} \rho^{\text{th}}(q_f, q'_f; t) &= \int d\mathbf{x}_f d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}'_i dq_i dq'_i \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}q' \int \mathcal{D}\bar{q} \int \mathcal{D}\mathbf{x} \int \mathcal{D}\mathbf{x}' \int \mathcal{D}\bar{\mathbf{x}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S[q, \mathbf{x}] - S[q', \mathbf{x}']) \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E[\bar{q}, \bar{\mathbf{x}}] \right\}. \end{aligned} \quad (2.155)$$

Nach Durchführung der Pfadintegrationen über die Badfreiheitsgrade und Bildung der Spur lautet die reduzierte Dichtematrix schließlich

$$\begin{aligned} \rho^{\text{th}}(q_f, q'_f; t) &= \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}q' \int \mathcal{D}\bar{q} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S_{\text{Sys}}[q] - S_{\text{Sys}}[q']) \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_{\text{Sys}}^E[\bar{q}] \right\} F_{\text{th}}[q, q', \bar{q}]. \end{aligned} \quad (2.156)$$

Dabei wird der Einfluß des Bades auf das Teilchen durch das Influenzfunktional $F_{\text{th}}[q, q', \bar{q}]$ berücksichtigt. Es koppelt die Wege der drei Funktionalintegrale miteinander in Form einer zeitlich nichtlokalen effektiven Wirkung. Daneben tritt nur noch die Wirkung S_{Sys} des ungedämpften Teilchens auf. Die Form des Influenzfunktionals ist vom betrachteten Badhamiltonian abhängig.

Für faktorisierende Anfangsbedingungen läßt sich eine propagierende Funktion $J(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i, 0)$ der reduzierten Dichtematrix mit der Eigenschaft

$$\rho(q_f, q'_f, t) = \iint dq_i dq'_i J(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i, 0) \rho(q_i, q'_i, 0) \quad (2.157)$$

angeben. Da die Anfangsbedingungen für das Teilchen gegeben sind, bleibt nach der Lösung der Pfadintegrationen über die Badkoordinaten ein doppeltes Realzeit-Pfadintegral

$$J(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i, 0) = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}q' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S_{\text{Sys}}[q] - S_{\text{Sys}}[q']) \right\} F_{\text{fac}}[q, q'] \quad (2.158)$$

über. Diese allgemeine Form der propagierenden Funktion der reduzierten Dichtematrix für faktorisierende Anfangsbedingungen geht auf Feynman und Vernon [1] zurück. Erneut steckt der gesamte Einfluß des Bades in der Kopplung der Wege durch das Influenzfunktional $F_{\text{fac}}[q, q']$.

2.4.5 Anwendung auf das Caldeira–Leggett–Modell

Thermodynamik

Zunächst wollen wir uns mit der Gleichgewichtsthermodynamik des Caldeira–Leggett–Hamiltonians beschäftigen. Sie wird durch den Imaginärzeitpropagator

$$\rho_{\text{ges}}(q, q', \mathbf{x}, \mathbf{x}', \beta) = Z^{-1} \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}\mathbf{x} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E[q, \mathbf{x}] \right\} \quad (2.159)$$

beschrieben. Da der Anteil der Badoszillatoren an der Wirkung linear ist, lassen sich die Pfadintegrationen über diese Freiheitsgrade exakt ausführen. Dabei sind die klassischen Lösungen der Bewegungsgleichungen durch von der Kraft $C_i q(t)$ getriebene harmonische Oszillatoren gegeben. In ihnen treten die Suszeptibilitäten der harmonischen Oszillatoren auf. Die quadratischen Fluktuationen hingegen entsprechen exakt denen des harmonischen Oszillators. Bildet man die Spur über die Badfreiheitsgrade, so verbleibt

$$\begin{aligned} \rho(q, q', \beta) &= Z^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_{Sys}^E[q] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' L(\tau - \tau') (q(\tau) - q(\tau'))^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.160)$$

Die Funktion $L(\tau)$ haben wir bereits in Gl. (2.33) im Rahmen der Diskussion des Zusammenhangs zwischen den mikroskopischen und makroskopischen Größen im Caldeira–Leggett–Modell angegeben. Wir werden die Auswertung des Imaginärzeitpropagators in dieser Arbeit nicht weiter verfolgen.

Realzeitdynamik

Das Influenzfunktional F ist für den Caldeira–Leggett–Hamiltonian sowohl im Fall faktorisierender Anfangsbedingungen wie auch für thermische Anfangsbedingungen explizit berechenbar. Dies kann durch direkte Berechnung der auftretenden Pfadintegrationen über die Badfreiheitsgrade geschehen, die vom Gaußschen Typ sind und denen getriebener harmonischer Oszillatoren entsprechen. Man kann aber auch direkt im Operatorformalismus vorgehen.

Das Ergebnis lautet für faktorisierende Anfangsbedingungen

$$F_{\text{fac}}[q, q'] = \exp\{i\Phi_{\text{fac}}[q, q']\} = \exp\{i\Phi'_{\text{fac}}[q, q']\} \exp\{-\Phi''_{\text{fac}}[q, q']\} \quad (2.161)$$

mit der Influenzphase

$$\begin{aligned} \Phi'_{\text{fac}}[q, q'] &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \int_{t'}^t dt'' [q(t') + q'(t')] K_2(t'' - t') [q(t'') - q'(t'')] \\ &\quad - \frac{1}{2\hbar} \int_0^t dt' \eta(0) [q^2(t') - q'^2(t')], \end{aligned} \quad (2.162)$$

$$\Phi''_{\text{fac}}[q, q'] = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [q(t') - q'(t')] K_1(t' - t'') [q(t'') - q'(t'')] \quad (2.163)$$

und den Größen $K_1(t)$, $K_2(t)$ und $\eta(0)$ aus (2.32) und (2.19). Unter der Benutzung der Definition von $K(t)$ in (2.32) kann man die Influenzphase auch als

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{fac}}[q, q'] &= \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [q(t') - q'(t')] [K(t' - t'')q(t'') - K^*(t' - t'')q'(t'')] \\ &\quad - \frac{1}{2\hbar} \int_0^t dt' \eta(0) [q^2(t') - q'^2(t')] \end{aligned} \quad (2.164)$$

schreiben. Bei der Herleitung beschreibt man das Bad zum Zeitpunkt $t = 0$ nach Gl. (2.152). Die vollständige Abhängigkeit

$$H'_{\text{Bad}} = \sum_i \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i(q)q}{m_i \omega_i^2} \right)^2 \right\} \quad (2.165)$$

des Hamiltonians (2.4) von den Badfreiheitsgraden wird auf

$$H_{\text{Bad}} = \sum_i \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \right\} \quad (2.166)$$

reduziert. In diesem Ansatz sind die Oszillatoren bei $x = 0$ festgehalten. Das Bad ist mit einem im Ursprung sitzenden Teilchen relaxiert. Diese Annahme ist sinnvoll, wenn die ansonsten beliebigen Anfangsbedingungen $\rho(q, q'; 0)$ des Teilchens eine Auszeichnung des Ursprungs rechtfertigen. Dies ist etwa für den Fall gegeben, daß das Teilchen im Koordinatenursprung präpariert wird⁷.

Geht man von thermischen Anfangsbedingungen aus, so ist die Influenzphase durch

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{th}}[q, q', \bar{q}] &= \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [q(t') - q'(t')] [K(t' - t'')q(t'') - K^*(t' - t'')q'(t'')] \\ &\quad - \frac{1}{2\hbar} \eta(0) \int_0^t dt' [q^2(t') - q'^2(t')] \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \bar{q}(\tau) L(\tau - \tau') \bar{q}(\tau') + \frac{i}{2\hbar} \eta(0) \int_0^{\hbar\beta} d\tau \bar{q}^2(\tau) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^t dt' \bar{q}(\tau) K^*(t' - i\tau) [q(t') - q'(t')] \end{aligned} \quad (2.167)$$

⁷Wie schon im Abschnitt 2.2.3 angedeutet wurde, ergibt sich dadurch ein Zusatzterm im Influenzfunktional. Er wird in der Fassung (5.2) des Influenzfunktional deutlich.

gegeben.

Der Einfluß des Bades läßt sich also für die betrachteten Anfangsbedingungen vollständig durch die Funktion $K(t)$ beschreiben. $K(t)$ ist aber mittels (2.32) durch die spektrale Dichte $J(\omega)$ bestimmt, die daher die relevante Kombination der mikroskopischen Parameter des Bades darstellt. Desweiteren ist $J(\omega)$ über (2.21) durch die makroskopische Größe $\eta(\omega)$ gänzlich festgelegt.

Die Wege $q(t)$, $q'(t)$ und $\bar{q}(\tau)$ lassen sich zu einem Weg $\tilde{q}(z)$ zusammensetzen, dessen Zeitargument z auf einer Kontur in der komplexen Ebenen verläuft. Bei der GSI-Kontur führt der Weg (z, x) vom Ausgangspunkt $(t + i0^-, x_f)$ über $(i0^-, x_i)$ und $(-i(\hbar\beta + 0^-), x_i)$ nach $(t - i(\hbar\beta + 0^-), x_f)$ [86]. Die Kadanoff-Baym-Kontur beginnt bei $(i0^+, x_i)$ und geht nach $(t + i0^+, x_f)$ und von $(t + i0^-, x_f)$ über $(i0^-, x_i)$ nach $(-i(\hbar\beta + 0^-), x_i)$ [59, 87]. Faßt man den zusammengesetzten Weg als entlang der gewählten Kontur zeitgeordnet auf, schreibt sich die Influenzphase bei thermischen Anfangsbedingungen als

$$\Phi_{\text{th}}[\tilde{q}] = \frac{i}{\hbar} \int dz \int dz' K(z - z') \tilde{q}(z) \tilde{q}(z') - \frac{1}{2\hbar} \eta(0) \int dz \tilde{q}^2(z). \quad (2.168)$$

Die quasiklassische Langevingleichung

Auch die propagierende Funktion der Dichtematrix läßt sich semiklassisch behandeln. Die klassischen Bewegungsgleichungen lassen sich am besten in den Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{q'(t) + q''(t)}{2}; \\ y(t) &= q'(t) - q''(t) \end{aligned} \quad (2.169)$$

aufstellen. Ausgehend von faktorisierenden Anfangsbedingungen lauten sie

$$\begin{aligned} m\ddot{x}(s) + \int_{t_0}^s dt' \eta(s - t') \dot{x}(t') - i m \int_{t_0}^s dt' K_1(s - t') y(t') + x_i \eta(t - t_0) \\ = -\frac{1}{2} [V'(r + y/2) + V'(r - y/2)] \end{aligned} \quad (2.170)$$

und

$$\begin{aligned} m\ddot{y}(s) - \int_s^t dt' \dot{y}(t') \eta(t' - s) + y_f \eta(t - s) \\ = -[V'(r + y/2) - V'(r - y/2)]. \end{aligned} \quad (2.171)$$

In diesen Gleichungen spielt t die Rolle eines Parameters. Eine triviale Lösung der zweiten Gleichung ist $y = 0$. Dann gelangt man zur deterministischen Gleichung

$$m\ddot{x}(s) + \int_{-\infty}^s dt' \eta(s - t') \dot{x}(t') + V'(x) = 0. \quad (2.172)$$

In ihr fehlt die Rauschkraft. Erst bei der semiklassischen Näherung des Pfadintegrals tritt sie auf. Dabei stellt man zunächst fest, daß die y -Koordinate durch den Imaginärteil des Influenzfunktionales mit steigender Badtemperatur immer stärker exponentiell unterdrückt wird. Daher kann man den Ausdruck des Influenzfunktionals bis zur zweiten Ordnung in y entwickeln und erhält eine Gaußsche Form für die Integrationen, die sich durchführen lassen. Dabei nutzt man die Relation

$$\exp(-\Phi''[y]) = \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau y(\tau)\xi(\tau)\right) \right\rangle_{\xi}, \quad (2.173)$$

der wir in Kapitel 5 wiederbegegnen werden. Insgesamt gelangt man so zu der Langevingleichung (2.1) in ihrer schon in Abschnitt 2.2.4 erwähnten quasiklassischen Form [68, 72, 73], in der die Rauschkraft durch die quantenmechanische Form (2.27) der Kovarianz $K_1(t)$ charakterisiert wird.

Bei der exakten quantenmechanischen Behandlung reicht die semiklassische Näherung nicht aus. Für ein beliebiges Potential lassen sich die Integrationen über die Systemfreiheitsgrade jedoch in der Regel nicht durchführen. Für einige Potentiale gelingt die Lösung für faktorisierte Anfangsbedingungen mittels spezieller Methoden. Dazu gehören das Cosinuspotential und das Tight-Binding-Gitter, mit denen sich diese Arbeit im folgenden beschäftigt.

Kapitel 3

Quantendiffusion auf dem Tight-Binding-Gitter

3.1 Das Tight-Binding-Modell

Das Tight-Binding-Modell ist dadurch gekennzeichnet, daß sich das Teilchen nur auf diskreten Gitterpunkten aufhält und sich ausschließlich durch Tunneln fortbewegen kann. Es ist anwendbar, wenn ein periodisches Topfpotential mit hohen Wänden bei tiefen Temperaturen betrachtet wird. Die erste Anregungsenergie $\hbar\omega_0$ innerhalb eines Topfes muß dazu sehr viel größer als die thermische Energie $k_B T$ sein.

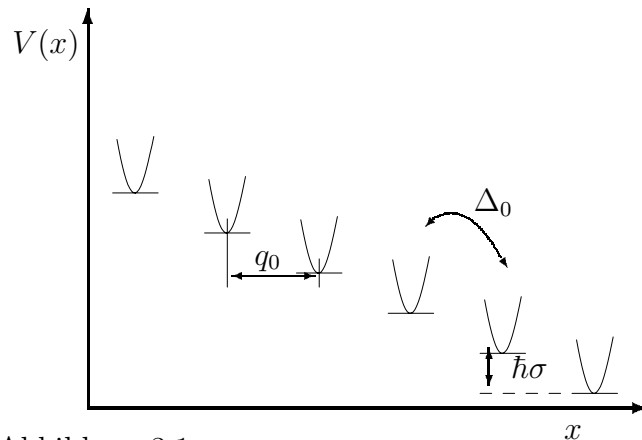


Abbildung 3.1: Schematische Veranschaulichung des Tight-Binding-Potentials mit Bias $\sigma = q_0 F / \hbar$

Ebenso soll die mit einem Tunnelprozeß verbundene Aufspaltungsenergie $\hbar\Delta_0$ weit unter der ersten Anregungsenergie $\hbar\omega_0$ liegen. Dann ist im thermodynamischen Gleichgewicht nur der Grundzustand eines jeden Topfes maßgeblich besetzt; höher angeregte Zustände tragen nicht bei. Liegt eine äußere Kraft an, so darf auch der Energiegewinn $\hbar\sigma$ je Tunnelprozeß nicht zu Anregungen führen. Es soll also

$$\hbar|\sigma|, \hbar\Delta_0, k_B T \ll \hbar\omega_0 \quad (3.1)$$

gelten, wobei den Verhältnissen der Energien der linken Seite dieser Abschätzung keine Beschränkungen auferlegt sind.

Bringt man das System durch eine Kraft in ein Nichtgleichgewicht, so muß die zusätzliche Bedingung erfüllt sein, daß in das Teilsystem nicht mehr Energie fließt, als es an das Bad abgeben kann. Dies ist für spektrale Dichten $J(\omega) = \eta_s \omega^s$ mit $s < 2$ erfüllt. Die Begründung dafür werden wir im Rahmen der Diskussion des Cosinuspotentials liefern, wobei insbesondere die dort erstmals durchgeführten Rechnungen im superohmschen Regime $1 < s < 2$ eine Rolle spielen werden. Für $s > 2$ dagegen bewegt sich das Teilchen im Langzeitlimes wie schon das Brownsche Teilchen mit einer renormierten Masse und wird konstant beschleunigt, so daß dann der Tight–Binding–Limes zusammenbricht.

Für das Tight–Binding–Modell kann man schwerlich ein Potential in Ortsdarstellung finden. Geht man allerdings zur Wannierdarstellung über und vernachlässigt dabei alle angeregten Wannierzustände, so erhält man als Hamiltonian für das Teilchen in zweiter Quantisierung

$$H_{\text{tb}} = -\hbar\sigma \sum_{n=-\infty}^{+\infty} n C_n^+ C_n - \frac{1}{2} \hbar \Delta_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1}). \quad (3.2)$$

C_n^+ und C_n sind Fermi–Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Der erste Term beschreibt den Bias durch die äußere Kraft $F = \hbar\sigma/q_0$. Die Gitterkonstante des Tight–Binding–Gitters bezeichnen wir hier mit q_0 . Die Besetzungsenergie der Mulde $n = 0$ haben wir gleich 0 gesetzt. Δ_0 ist das Tunnelmatrixelement oder auch Hoppingintegral. Es ist durch den Überlapp der Wannierfunktionen gegeben. In einer Dimension hat man

$$\Delta_0 = \frac{2}{\hbar} \int dx w(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) w(q_0 + x), \quad (3.3)$$

wobei nur Sprünge zwischen benachbarten Mulden zugelassen sind.

Bezeichnet man mit $|n\rangle$ den Zustand des Teilchens, in dem es sich in der n . Mulde im Wannier–Grundzustand befindet, so erhält der dem Hamiltonian (3.2) zugeordnete Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$ in dieser Basis eine Gestalt, die einen Hinweis auf die richtige Behandlung der Pfadintegrationen im Rahmen der Tight–Binding–Näherung gibt. Dazu führen wir die Operatoren \hat{n} , \hat{a} und \hat{a}^+ ein, die durch ihre Wirkung

$$\begin{aligned} \hat{n}|m\rangle &= m|m\rangle \\ \hat{a}|m\rangle &= |m-1\rangle \\ \hat{a}^+|m\rangle &= |m+1\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

definiert sind. Damit erhält der Hamiltonian die Form

$$H_{\text{tb}} = -\hbar\sigma \hat{n} - \frac{1}{2} \hbar \Delta_0 (\hat{a} + \hat{a}^+). \quad (3.5)$$

In der üblichen Form der zeitabhängigen Störungsrechnung ergeben sich so die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators zu

$$\langle l|\hat{U}(t)|m\rangle = \sum_{n=|l-m|}^{\infty} \left(\frac{i\Delta_0}{2}\right)^n \sum_{\{u_i\}'} \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \exp\left\{-i\sigma \sum_{i=1}^n u_i t_i\right\}. \quad (3.6)$$

Dabei ist die Kombinatorik der $\{u_i\}$ der Randbedingung

$$\sum_{i=1}^n u_i = l - m \quad (3.7)$$

unterworfen. u_i hat die Werte $+1$ oder -1 und gibt dabei die Richtung eines jeden Tunnelprozesses an.

Auf die Gleichung (3.6) kommt man, indem man die Exponentialfunktion des Zeitentwicklungsoperators entwickelt, als zeitgeordnetes Produkt im Sinne der Störungsentwicklung schreibt und schrittweise die drei Terme des Hamiltonians ausmultipliziert. Anschließend werden alle Terme derselben Ordnung in Δ_0 gesammelt. Dabei kann zwischen zwei Tunnelprozessen beliebig oft der Muldenenergieterm proportional zu \hat{n} wirken. Summiert man ihn auf, so erhält man gerade den exponentiellen Biasterm.

Der Vergleich von (3.6) mit (2.143) ergibt, daß die beiden Größen Δ_0 identisch sind. Der modellabhängige Parameter ω_0 tritt in (3.6) nicht mehr auf, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Mulde n im diskreten Gitter durch

$$P_n(t) = \int_{(n-1/2)q_0}^{(n+1/2)q_0} \rho(x, x; t) dx \quad (3.8)$$

gebildet wird. Der Vorfaktor in (3.6) ist jedoch gerade über ein solches Normierungsintegral bestimmt. Man beachte auch, daß der Propagator in Ortdarstellung ebenso wie die Dichtematrix die Dimension $[1/x]$ hat. In der diskretisierten Ortsdarstellung dagegen kommt diesen Größen ebenso wie der Besetzungswahrscheinlichkeit die Dimension 1 zu. Damit hebt sich der Vorfaktor genau weg. Wie man sich weiterhin klar machen kann, ist dies auch dann der Fall, wenn man statt der Oszillator-Grundzustandsfunktion einen allgemeinen Ansatz für die in den Mulden konzentrierten Zustände macht. Drückt man $\rho(x, x; t)$ in der Darstellung der Muldenfunktionen aus, so trägt fast ausschließlich die Funktion $|n\rangle$ zum Integral (3.8) bei, und es verbleibt das Normierungsintegral $\langle n|n\rangle$. Genauso kann man auch mit dem Propagator verfahren. Im Propagator jedoch wird genau dieses Normierungsintegral für die Festsetzung des Vorfaktors herangezogen.

Das Tunnelmatrixelement Δ_0 gibt im Hamiltonian (3.2) die Bandbreite der Energiezustände an. Die Energieeigenfunktionen sind dabei gerade die Blochwellenfunktionen. Auch im Pfadintegralformalismus läßt sich diese Bandbreite berechnen. Sie ergibt sich gerade zu

$$E_{\max} - E_{\min} = \hbar\Delta_0. \quad (3.9)$$

Die Durchführung der inversen Wickrotation in (2.143) ergibt für jedes Zeitintegral eine Multiplikation mit i . Jeder Tunnelprozeß führt also zu einem Faktor $i\Delta_0/2$. Vom Pfadintegral bleiben desweiteren die Integrationen über die Tunnelzentrenzeiten übrig. Der Faktor $\exp\{-\omega_0\tau/2\}$ dagegen verschwindet nach inverser Wickrotation bei der Bildung des Propagators der Dichtematrix, da er dort auch konjugiert komplex auftritt.

Parameterrenormierung durch das Bad

Die Kopplung an das Wärmebad sowie der Pfadintegralformalismus beruhen auf der Ortsdarstellung. Daher ist der Hamiltonian (3.2) für das Teilchen nicht der geeignete Ausgangspunkt für das weitere Vorgehen. Das Tunnelmatrixelement Δ spielt jedoch auch im folgenden eine Rolle.

Aus der Anwesenheit der Badoszillatoren resultiert ein renormiertes Tunnelmatrixelement. Das Teilchen tunnelt auf einer Zeitskala von Δ_0^{-1} ; ihm können daher nur Badoszillatoren folgen, deren Eigenfrequenzen in derselben Größenordnung wie Δ_0 oder darüber liegen. In einer einfachen Abschätzung berücksichtigt man den Einfluß dieser Badoszillatoren durch eine renormierte Masse. Ausgehend von der WKB-Näherung des Tunnelmatrixelementes, in der die Masse im Exponenten auftritt, muß man somit auch eine Änderung des Tunnelmatrixelementes erwarten. Tatsächlich läßt es sich erneut über ein Verhältnis von Determinanten berechnen, wobei man das Bad über die effektive Wirkung berücksichtigt. Es ergibt sich [16]

$$\Delta = \Delta_0 \exp \left\{ -\frac{q_0^2}{2\pi\hbar} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \right\}. \quad (3.10)$$

ω_c ist eine passend gewählte Abschneidefrequenz. In Endergebnissen tritt sie in der Regel gerade in einer Kombination mit Δ auf, in der sie sich heraushebt. Man erhält dann ein renormiertes Tunnelmatrixelement Δ_r , das nur noch von Δ_0 und der spektralen Dichte sowie von durch das Potential gegebenen geometrischen Faktoren abhängt [16].

3.2 Formal exakte Lösungen

3.2.1 Durchführung der Pfadintegration

Im Tight-Binding-Modell ist das Pfadintegral (2.158) lösbar [35, 39, 43]. Da das Teilchen sich auf einem diskreten Gitter bewegt, lauten seine Trajektorien

$$q'(t) = q_0 \sum_{i=1}^{m'} u_i \Theta(t - t'_i);$$

$$q''(t) = q_0 \sum_{i=1}^{m''} v_i \Theta(t - t_i) \quad (3.11)$$

beziehungsweise in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (2.169)

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{q'(t) + q''(t)}{2} = \frac{q_0}{2} \sum_{i=1}^{2m} \chi_i \Theta(t - t_i); \\ y(t) &= q'(t) - q''(t) = q_0 \sum_{i=1}^{2m} \xi_i \Theta(t - t_i) \end{aligned} \quad (3.12)$$

mit $2m = m' + m''$. Zu den Zeiten t_i findet ein Tunnelprozeß statt; die Koeffizienten u_i und v_i sowie ξ_i und χ_i legen die Richtung des Tunnelvorganges fest. Die Trajektorien (3.11) stellen ein vollständiges Funktionensystem dar.

Um das doppelte Pfadintegral (2.158) für den Dichtematrixpropagator durchzuführen, bringen wir die Influenzphase (2.164) durch partielle Integration in eine geeignete Form:

$$\Phi[x, y] = \frac{2}{q_0^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \dot{y}(\tau) Q_1(\tau - s) \dot{x}(s); \quad (3.13)$$

$$\Phi''[y] = -\frac{1}{q_0^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \dot{y}(\tau) Q_2(\tau - s) \dot{y}(s) \quad (3.14)$$

mit

$$Q_1(t) = \frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t); \quad (3.15)$$

$$Q_2(t) = \frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos(\omega t)) \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right). \quad (3.16)$$

Wir definieren an dieser Stelle mit

$$Q(t) = Q_2(t) + iQ_1(t) = \frac{q_0^2}{\pi \hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\cosh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) - \cosh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2} - i\omega t\right)}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)} \quad (3.17)$$

eine erneut auf $-\hbar\beta < \text{Im } t < 0$ analytische Funktion, die man darüber hinaus periodisch fortsetzen kann. Sie weist die Eigenschaften

$$Q(t - i\tau) = Q(-t + i[\tau - \hbar\beta]) = Q^*(-t - i\tau) \quad (3.18)$$

auf und ist über

$$\ddot{Q}(t) = \frac{q_0^2}{\hbar} K(t) \quad (3.19)$$

mit $K(t)$ aus (2.32) verbunden.

Wird das Teilchen bei $t = 0$ in der Mulde 0 präpariert, ist die Wahrscheinlichkeit $P_n(t)$, das Teilchen zum Zeitpunkt t in der Mulde n zu finden, durch

$$P_n(t) = \rho(nq_0, nq_0, t) = J(nq_0, nq_0, t; 0, 0, 0) \quad (3.20)$$

gegeben. Da die Trajektorien (3.12) bei $(0, 0)$ starten und bei (nq_0, nq_0) enden, muß

$$\sum_{i=1}^{2m} \chi_i = 2n \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{2m} \xi_i = 0 \quad (3.21)$$

erfüllt sein.

Setzt man (3.12) in das Pfadintegral ein, so ergibt jeder Tunnelübergang im Term der kinetischen Energie einen singulären Beitrag. Betrachtet man die Tight-Binding-Trajektorien als idealisierte Instantonen, erhält man für jedes Tunneln einen Faktor $i\Delta/2$ mit dem in (3.10) gegebenen renormierten Tunnelmatrixelement. Hier macht sich die Massenabhängigkeit des Terms der kinetischen Energie bemerkbar.

Da über alle Wege summiert werden soll, erhält man also eine zeitgeordnete Integration

$$\int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] = \int_0^t dt_{2m} \int_0^{t_{2m}} dt_{2m-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \quad (3.22)$$

über die Tunnelzeiten t_i sowie die Kombinatorik

$$\sum_{\{\xi_j = \pm 1\}'} \sum_{\{\chi_j = \pm 1\}'} \quad (3.23)$$

über die Klassen $\{\xi_i\}$ und $\{\chi_i\}$, die den Randbedingungen (3.21) unterliegt. Der Strich an der Klassenbezeichnung weist auf diese Beschränkung hin.

Der Biasterm erhält die Form

$$G_m = \exp \left(-i\sigma \sum_{i=1}^{2m} \xi_i t_i \right), \quad (3.24)$$

die Influenzphase wird zu

$$\Phi' = \sum_{i>j} \xi_i \chi_j Q_1(t_i - t_j); \quad (3.25)$$

$$\Phi'' = -\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j). \quad (3.26)$$

An dieser Stelle führen wir

$$H_m = \exp \left(\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j) \right) \quad (3.27)$$

ein. Insgesamt ergibt sich für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Mulde n

$$\begin{aligned}
P_n(t) &= \sum_{m=|n|}^{\infty} (-1)^{m-n} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \sum_{\{\chi_j=\pm 1\}'} \exp\left(-i\sigma \sum_{j=1}^{2m} \xi_j t_j\right) \\
&\quad \times \exp\left(\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j)\right) \exp\left(i \sum_{i>j} \xi_i \chi_j Q_1(t_i - t_j)\right) \\
&= \sum_{m=|n|}^{\infty} (-1)^{m-n} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \sum_{\{\chi_j=\pm 1\}'} \\
&\quad \times G_m H_m \exp\left(i \sum_{i>j} \xi_i \chi_j Q_1(t_i - t_j)\right). \tag{3.28}
\end{aligned}$$

3.2.2 Das erzeugende Funktional und die ersten beiden Momente

Bildet man das erzeugende Funktional

$$Z^{(\text{tb})}(\kappa, t) = \langle \exp(i\kappa \hat{q}(t)) \rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_n(t) \exp(i\kappa q_0 n), \tag{3.29}$$

so ist die Summation über $\{\chi_i\}$ durchführbar, und man erhält

$$\begin{aligned}
Z^{(\text{tb})}(\kappa, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \exp\left(-i\sigma \sum_{j=1}^{2m} \xi_j t_j\right) \\
&\quad \times \exp\left(\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j)\right) \sin(\kappa q_0/2) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\kappa q_0/2 + \eta_{j,2m}) \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \Delta^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} G_m H_m A_m(\kappa) \tag{3.30}
\end{aligned}$$

mit

$$A_m(\kappa) = \sin(\kappa q_0/2) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\kappa q_0/2 + \eta_{j,2m}) \tag{3.31}$$

und

$$\eta_{j,2m} = \sum_{k=j+1}^{2m} \xi_k Q_1(t_k - t_j). \tag{3.32}$$

Aus dem erzeugenden Funktional lassen sich alle Momente herleiten. Sie ergeben sich durch Ableiten zu

$$\langle \hat{q}^n(t) \rangle = \frac{\partial^n Z(\kappa)}{\partial (i\kappa)^n} \Big|_{\kappa=0}. \tag{3.33}$$

Andererseits kann man aus $Z(\kappa)$ auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $P_n(t)$ zurückgewinnen:

$$P_n(t) = q_0 \int_{n-1/2}^{n+1/2} dx \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa Z(\kappa) \exp(-i\kappa q_0 x) . \quad (3.34)$$

Mit dem erzeugenden Funktional (3.30) ergeben sich somit die formal exakten Ausdrücke für das erste Moment

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(t) \rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{q_0}{2} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}'} \sin \left(\sigma \sum_{j=1}^{2m} \xi_j t_j \right) \\ &\times \exp \left(\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j) \right) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\eta_{j,2m}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

und das zweite Moment

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}^2(t) \rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{q_0^2}{2} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}'} \cos \left(\sigma \sum_{j=1}^{2m} \xi_j t_j \right) \\ &\times \exp \left(\sum_{i>j} \xi_i \xi_j Q_2(t_i - t_j) \right) \sum_{i=1}^{2m-1} \cot(\eta_{i,2m}) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\eta_{j,2m}) . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Für spätere Rechnungen führen wir die Abkürzungen

$$a_m = \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\eta_{j,2m}) \quad (3.37)$$

und

$$b_m = \sum_{i=1}^{2m-1} \cot(\eta_{i,2m}) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\eta_{j,2m}) = \sum_{i=1}^{2m-1} \cos(\eta_{i,2m}) \prod_{j=1}^{2m-1} ' \sin(\eta_{j,2m}) \quad (3.38)$$

ein. Der Strich am Produktsymbol deutet auf die Weglassung des vorgezogenen Terms im Summanden hin.

3.2.3 Differenzzeiten und Laplacetransformation

Als nächstes bringen wir die obigen Ausdrücke in eine Form, die vor allem die Betrachtung des Langzeitverhaltens erleichtert. Mit den Differenzzeiten

$$\tau_l = t_{l+1} - t_l \quad (l = 0 \dots 2m) , \quad (3.39)$$

wobei $t_0 = 0$ und $t_{2m+1} = t_f$ gesetzt sind, und unter Einführung einer δ -Funktion ersetzen wir die Integration über die Tunnelzeiten durch die über die Differenzzeiten und schreiben

$$\int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] = \int_0^\infty d\tau_0 \int_0^\infty d\tau_1 \dots \int_0^\infty d\tau_{2m} \delta\left(\sum_{l=0}^{2m} \tau_l - t\right). \quad (3.40)$$

Nun gehen wir zu den nach der Zeit laplacetransformierten Ausdrücken über. Die Integration über t läßt sich wegen der δ -Funktion direkt durchführen. Gleiches gilt für die Differenzzeiten τ_0 und τ_{2m} , die nur in der Exponentialfunktion der Laplacetransformation auftreten. Mit den Abkürzungen

$$\tau_{i,j-1} = t_j - t_i = \sum_{k=i}^{j-1} \tau_k \quad (3.41)$$

und

$$g_{j,2m} = \sum_{k=i+1}^{2m} \xi_k \quad (3.42)$$

sowie

$$\int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] = \int_0^\infty d\tau_1 \int_0^\infty d\tau_2 \dots \int_0^\infty d\tau_{2m-1} \quad (3.43)$$

lauten dann die ersten beiden Momente

$$\begin{aligned} & \langle \hat{q}(\lambda) \rangle \quad (3.44) \\ &= \frac{q_0}{2} \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{1,2m-1}\} \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \\ & \times \sin\left(\sigma \sum_{j=1}^{2m-1} g_{j,2m} \tau_j\right) \exp\left(\sum_{j>i} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin\left(\sum_{j=i+1}^{2m} \xi_j Q_1(\tau_{i,j-1})\right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} & \langle \hat{q}^2(\lambda) \rangle \quad (3.45) \\ &= \frac{q_0^2}{2} \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{1,2m-1}\} \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \cos\left(\sigma \sum_{j=1}^{2m-1} g_{j,2m} \tau_j\right) \\ & \times \exp\left(\sum_{j>i} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \sum_{i=1}^{2m-1} \cot\left(\sum_{j=i+1}^{2m} \xi_j Q_1(\tau_{i,j-1})\right) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin\left(\sum_{j=i+1}^{2m} \xi_j Q_1(\tau_{i,j-1})\right). \end{aligned}$$

3.2.4 Das Ladungsbild

Trägt man die Koeffizienten $\{\xi_i\}$ eines bestimmten Weges wie in Abb. (3.2) graphisch auf, so kann man sie als Ladungen eines insgesamt neutralen Coulombgases

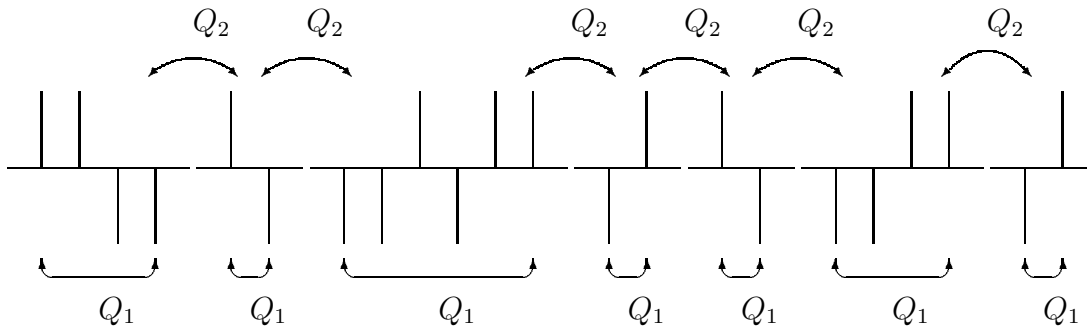


Abbildung 3.2: Zerlegung des Instantonengases in neutrale Cluster

interpretieren, die miteinander über $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$ wechselwirken und einem E-Feld ausgesetzt sind. Die Tunnelzeiten entsprechen den räumlichen Positionen der Ladungen. Die Graphen kann man in Ladungsansammlungen zerlegen, die in sich wieder neutral sind. Die Wechselwirkung zwischen diesen neutralen Cluster wird durch $Q_1(t)$ vermittelt, während $Q_2(t)$ für die Wechselwirkung innerhalb eines neutralen Clusters verantwortlich ist. Dies wird bei der Betrachtung des Langzeitverhaltens von Bedeutung sein.

Der Kombinatorik über $\{\xi_i\}$ sowie den Integrationen über die Tunnelzeiten entspricht im Bild der Ladungen die Summation über alle möglichen räumlichen Anordnungen. Damit entspricht das erzeugende Funktional $Z(\kappa)$ einer Art Zustandssumme des neutralen Coulombgases.

3.3 Langzeitverhalten

Anhand der laplacetransformierten Ausdrücke (3.44) und (3.45) für das erste und das zweite Moment lassen sich qualitative Aussagen über das Langzeitverhalten treffen. Wir beschränken uns auf den Fall $s < 2$. Für $s > 2$ verhält sich das Teilchen im Langzeitlimes wie ein ungedämpftes Teilchen mit renormierter Masse. Für große Zeiten ist allein der Pol bei $\lambda = 0$ von Bedeutung. Alle anderen Pole führen zu exponentiell abklingenden Termen, die im Übergangsbereich von Bedeutung sein können, mit der Zeit aber aussterben. Die Ordnung des Pols ist dadurch bestimmt, ob die Integrale über die Differenzzeiten für $\lambda = 0$ existieren. Ist dies nicht der Fall, so muß man λ zunächst endlich halten und dann den Grenzübergang $\lambda \rightarrow 0$ durchführen.

3.3.1 Die Wechselwirkungsterme

An der oberen Integrationsgrenze können nur die Wechselwirkungsterme $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$ für Konvergenz sorgen. Daher ist die Beantwortung der Frage nach

der Konvergenz mit dem Verhalten von $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$ für große Argumente verknüpft. Dieses wiederum ist durch die Form der spektralen Dichte bei $\omega = 0$ gegeben. Die Integrale

$$Q_1(t) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) \quad (3.46)$$

und

$$Q_2(t) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos(\omega t)) \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) \quad (3.47)$$

konvergieren an der unteren Integrationsgrenze. An der oberen Integrationsgrenze konvergieren sie für $0 < s < 2^1$. Im Laplaceraum erhält man nach Reskalierung der Integrationsvariablen

$$\tilde{Q}_1(\lambda) = \eta_s \frac{d^2}{\pi\hbar} \lambda^{s-2} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{1+x^2} f(\lambda x/\omega_c) \quad (3.48)$$

sowie

$$\tilde{Q}_2(\lambda) = \eta_s \frac{d^2}{\pi\hbar} \lambda^{s-2} \int_0^\infty dx \frac{x^s}{1+x^2} \coth\left(\frac{\hbar\beta x \lambda}{2}\right) f(\lambda x/\omega_c) \quad (3.49)$$

Die Funktion $f(\lambda x/\omega_c)$ schneidet bei hohen Frequenzen ab. Für $Q_2(t)$ benutzt man die Einschachtelung des \coth nach (2.83). Insgesamt erhält man

$$Q_1(\tau) \sim \tau^{1-s} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (3.50)$$

$$Q_2(\tau) \sim \begin{cases} \tau^{2-s} & s < 2 \\ \text{const.} & s \geq 2 \end{cases} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (3.51)$$

sowie

$$\dot{Q}_1(\tau) \sim \begin{cases} \tau^{-s} & s \neq 1 \\ \tau^{-2} & s = 1 \end{cases} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (3.52)$$

$$Q_2(\tau) \sim \begin{cases} \tau^{2-s} & s < 2 \\ \text{const.} & s \geq 2 \end{cases} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (3.53)$$

$$\ddot{Q}_2(\tau) \sim \begin{cases} \tau^{-s} & s < 2 \\ \text{const.} & s \geq 2 \end{cases} \quad \tau \rightarrow \infty \quad (3.54)$$

Für strikt ohmsche Dissipation verschwindet $\dot{Q}_1(t)$ sogar exakt.

¹Für $s > 1$ ergibt sich bei $Q_2(t)$ ein divergenter zeitunabhängiger Term, der nach Durchführung der Kombinatorik aufgrund der Randbedingungen (3.21) verschwindet.

3.3.2 Konvergenz der Integrale für $1 \leq s < 2$

Betrachtet man die Integration über eine Differenzzeit τ_k , so erhält der Wechselwirkungsterm H_m (3.27) für großes τ_k und $g_{k,2m} \neq 0$ die Form

$$\exp\left(\sum_{i < j} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \approx \exp\left(-g_{k,2m}^2 Q_2(\tau_k)\right). \quad (3.55)$$

Ist dagegen $g_{k,2m} = 0$, so muß man um τ_k herum entwickeln und findet

$$\begin{aligned} H_m &= \exp\left(\sum_{i < j} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \\ &\approx \exp\left(-\ddot{Q}_2(\tau_k) \left(\sum_{r=k+1}^{2m-1} g_{r,2m} \tau_r\right) \left(\sum_{s=1}^{k-1} g_{s,2m} \tau_s\right)\right) \\ &\quad \times \exp\left(\sum_{i < j \leq k} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \exp\left(\sum_{k+1 \leq i < j} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Dabei wird in den Summen k festgehalten und über i und j summiert. Zudem werden jeweils alle anderen Differenzzeiten endlich gehalten. Mit diesen asymptotischen Ausdrücken erkennt man, daß für $s < 2$ die Konvergenz im Fall $g_{k,2m} \neq 0$ gesichert ist, während dies für $g_{k,2m} = 0$ zumindestens nicht durch die Wechselwirkung über $Q_2(t)$ gewährleistet ist. Daher spricht man bei diesem Term von der Intraclusterwechselwirkung. Für $g_{k,2m} = 0$ muß das Verhalten der von $Q_1(t)$ abhängigen Terme (3.37) und (3.38) untersucht werden, die von $A(\kappa)$ (3.31) herrühren. Man erhält für die in (3.32) definierte Größe $\eta_{j,2m}$ das Verhalten

$$\sum_{l=k+1}^{2m} \xi_l Q_1(\tau_{k,l-1}) \approx \dot{Q}_1(\tau_k) \left(\sum_{l=k+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l\right). \quad (3.57)$$

Da $\dot{Q}_1(\tau_k)$ für $1 \leq s < 2$ stark genug abfällt, konvergieren für das erste Moment in diesem Bereich auch die Integrale über Interclusterdifferenzzeiten. Beim zweiten Moment gibt es Terme, in denen $\eta_{k,2m}$ als Argument eines Cosinus auftritt. Es verbleibt also eine Divergenz. Nimmt man in einem solchen Term die Ersetzung $\xi_i \rightarrow -\xi_i$ für $i > k$ vor, so ergibt sich ein Vorzeichenwechsel. Nach Durchführung der Kombinatorik heben sich also die Divergenzen weg, so daß auch die Differenzzeitintegrationen des zweiten Momentes für $1 \leq s < 2$ bei $\lambda = 0$ existieren. Es verbleibt also jeweils ein Pol zweiter Ordnung in λ . Somit wachsen sowohl das erste als auch das zweite Moment linear mit t .

3.3.3 Subohmsche Dissipation

Für subohmsche Dissipation gewährleistet $Q_1(t)$ nicht mehr die Konvergenz von Differenzzeitintegrationen über Interclusterzeiten τ_{2k_i} mit $g_{2k_i,2m} = 0$. Solche Zeiten werden also nicht unterdrückt. Daher muß man bei ihnen die Laplacevariable

λ endlich halten und die Ordnung des Pols bei $\lambda = 0$ bestimmen. Da der Hauptbeitrag eines solchen Integrals von der oberen Integrationsgrenze stammt, an der die τ_{2k_i} größer als alle anderen Differenzzeiten sind, kann man erneut um diese Zeiten entwickeln. Dies ermöglicht es, das Langzeitverhalten der ersten beiden Momente analytisch zu bestimmen, da die Integranden dann in neutrale Cluster faktorisieren [88]. Das Vorgehen ist für die Betrachtung des superohmschen Falles im Cosinus-Potential von Bedeutung und wird daher an dieser Stelle ausführlich diskutiert.

Benutzt man für H_m die Näherung (3.56) und für a_m (3.37) und b_m (3.38) entsprechend (3.57) und beachtet

$$\dot{Q}_1(\tau_{2k_i}) \rightarrow 0 \quad \text{für } \tau_{2k_i} \rightarrow 0, \quad (3.58)$$

so erhält man die Faktorisierungen

$$H_m = H_{k_i} \times H_{m-k_i}; \quad (3.59)$$

$$b_m = a_{k_i} \times a_{m-k_i} + \left(a_{k_i} \times b_{m-k_i} + b_{k_i} \times a_{m-k_i} \right) \dot{Q}_1(\tau_{2k_i}) \sum_{l=2k_i+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l;$$

$$a_m = a_{k_i} \times a_{m-k_i} \dot{Q}_1(\tau_{2k_i}) \sum_{l=2k_i+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l.$$

Die letzten beiden Ausdrücke gelten nur unter Ausführung der Kombinatorik über partiell gespiegelte Wege. Dadurch verschwinden Terme der Form

$$\dot{Q}_1(\tau_{2k_p} + \tau_{2k_{p+1}}) \sum_{l=2k_{p+1}+1}^{2k_{p+2}-1} g_{l,2m} \tau_l, \quad (3.60)$$

die sowohl bei der Faktorisierung bei τ_{2k_i} wie auch bei einer anschließenden Faktorisierung bei τ_{2k_j} auftreten. Tatsächlich erhält man bei vollständiger Faktorisierung um alle Interclusterdifferenzzeiten eine Dreiecksform, die für das erste Moment die folgende Gestalt hat:

$$\begin{aligned} a_m &= \prod_{i=1}^{2k_{s+1}} a_{k_i - k_{i-1}} \\ &\times \left[\left(\dot{Q}_1(\tau_{2k_1}) \sum_{l=2k_1+1}^{2k_2-1} g_{l,2m} \tau_l + \dot{Q}_1(\tau_{2k_1} + \tau_{2k_2}) \sum_{l=2k_2+1}^{2k_3-1} g_{l,2m} \tau_l + \dots \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \dots + \dot{Q}_1(\tau_{2k_1} + \dots + \tau_{2k_s}) \sum_{l=2k_s+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l \right) \right. \\ &+ \left(\dot{Q}_1(\tau_{2k_2}) \sum_{l=2k_2+1}^{2k_3-1} g_{l,2m} \tau_l + \dots + \dot{Q}_1(\tau_{2k_2} + \dots + \tau_{2k_s}) \sum_{l=2k_s+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l \right) \\ &\dots \\ &+ \left. \dot{Q}_1(\tau_{2k_s}) \sum_{l=2k_s+1}^{2m-1} g_{l,2m} \tau_l \right] \quad (3.61) \end{aligned}$$

mit $k_0 = 0$ und $k_{s+1} = m$. Zusammen mit dem Biasterm ergibt sich damit ein Ausdruck, von dem unter partieller Spiegelung aller neutralen Cluster nur die Diagonale übrigbleibt. Daher lassen sich die ohnehin verschwindenden Anteile proportional zu $\hat{Q}_1(\tau_{2k_i} + \dots + \tau_{2k_j})$, in denen die Argumente mehrere Interclusterzeiten gekoppelt sind, auch als ungekoppelte Terme proportional zu $\hat{Q}_1(\tau_{2k_i})$ schreiben, wie das oben geschehen ist. Diese Argumentation läßt sich in analoger Weise auch für die Faktorisierung von b_m führen. Allein bei der Behandlung der Einsteinrelation im superohmschen Regime des Cosinuspotentials führt eine solche Faktorisierung dazu, daß gekoppelte Terme überleben. Schreibt man für das linearisierte Moment

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_l = \frac{q_0 \sigma}{2 \lambda^2} n_1(\lambda) ; \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} n_1(\lambda) &= \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] \exp \{ -\lambda \tau_{1,2m-1} \} \sum_{\{\xi_j = \pm 1\}} \left(\sum_{j=1}^{2m-1} g_{j,2m} \tau_j \right) \\ &\times \exp \left(\sum_{j>i} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1}) \right) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\sum_{j=i+1}^{2m} \xi_j Q_1(\tau_{i,j-1}) \right) , \end{aligned} \quad (3.63)$$

so ergibt nun Entwickeln um die letzte Interclusterdifferenzzeit τ_{2k_s} sowie Addition der partiell nach dieser Zeit gespiegelten Wege ($g_{i,2m} \rightarrow -g_{i,2m}$ für $i < 2k_s$) die Faktorisierung

$$n_1(\lambda) = n_1^{(k)}(\lambda) - n_1(\lambda) \lambda Q_1(\lambda) n_1^{(k)}(\lambda) . \quad (3.64)$$

Dabei entspricht $n_1^{(k)}(\lambda)$ der Größe $n_1(\lambda)$, wobei jedoch keine divergenten Interclusterintegrationen mehr auftreten, da sich die Kombinatorik auf einen neutralen Cluster beschränkt. Daher ist diese Größe für $\lambda \rightarrow 0$ konvergent. Löst man die Gleichung (3.64) nach $n_1(\lambda)$ auf, so ergibt sich schließlich

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_l = \frac{q_0 \sigma}{2 \lambda^2} \frac{n_1^{(k)}(\lambda)}{1 + n_1^{(k)}(\lambda) f_1(\lambda)} \approx \frac{q_0 \sigma}{2 \lambda^2} \frac{1}{f_1(\lambda)} \quad (\lambda \rightarrow 0) \quad (3.65)$$

mit

$$f_1(\lambda) = \lambda Q_1(\lambda) \approx \frac{q_0^2}{2\hbar \sin(s\pi/2)} \eta_s \lambda^{s-1} \quad (\lambda \rightarrow 0) . \quad (3.66)$$

Rücktransformation in das Zeitregime ergibt damit

$$\langle \hat{q}(t) \rangle_l = \frac{\hbar \sigma \sin(s\pi/2)}{q_0 \eta_s \Gamma(1+s)} t^s \quad (t \rightarrow \infty) . \quad (3.67)$$

Der Vergleich mit (2.104) ergibt, daß dies gerade dem Ergebnis des freien Teilchens entspricht. Es ist bemerkenswert, daß alle Systemparameter wie Gitterkonstante q_0 und Tunnelmatrixelement Δ nicht zur führenden Ordnung beitragen. Allerdings wird der Gültigkeitsbereich des Langzeitlimes durch diese Größen bestimmt. Insbesondere sollte für $\Delta \rightarrow 0$ der Zeitpunkt, ab dem die Näherung gerechtfertigt ist, immer weiter nach hinten geschoben werden, und es ist denkbar, daß in physikalisch relevanten Bereichen Terme niedrigerer Ordnung dominant sind.

Unsere Herleitung entspricht in gewissem Maße einer Entwicklung in eine geometrischen Reihe in $a = n_1^{(k)}(\lambda)f_1(\lambda)$. Die Dyson-Formulierung (3.64) ist für beliebiges a definiert, während die Durchführung der vollständigen Entwicklung für $a \geq 1$ divergieren würde. Dieses formale Divergenzproblem liegt in der nichtstörungstheoretischen Natur des Tunnelprozesses [89], die für kleine Dämpfung zum Tragen kommt und sich auch für $\alpha < 1$ bei ohmscher Dissipation bemerkbar macht.

Bei der Betrachtung des zweiten Momentes in Abwesenheit äußerer Kräfte folgen mit

$$\langle \hat{q}^2(\lambda) \rangle = \frac{q_0^2}{2} \frac{1}{\lambda^2} n_2(\lambda) \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} n_2(\lambda) &= \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{1,2m-1}\} \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \quad (3.69) \\ &\times \exp\left(\sum_{j>i} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \sum_{i=1}^{2m-1} \cot(\eta_{i,2m}) \prod_{j=1}^{2m-1} \sin(\eta_{j,2m}) \end{aligned}$$

und unter Faktorisierung um die erste sowie um die letzte Interclusterzeit die Gleichungen

$$n_2(\lambda) = n_2^{(k)}(\lambda) - 2n_2^{(k)}(\lambda)f_1(\lambda)n_1(\lambda) + n_1^{(k)}(\lambda)f_2(\lambda)n_1(\lambda); \quad (3.70)$$

$$n_2(\lambda) = n_2^{(k)}(\lambda) - n_2(\lambda)f_1(\lambda)n_1^{(k)}(\lambda), \quad (3.71)$$

wobei

$$f_2(\lambda) = \lambda^2 Q_2(\lambda) \quad (3.72)$$

ist. Auflösen nach $n_2(\lambda)$ ergibt unter der Benutzung von (2.83) das Ergebnis

$$n_2(\lambda) = n_1(\lambda) \frac{f_2(\lambda)}{f_1(\lambda)} \approx n_1(\lambda) \frac{2}{\hbar\beta} \quad (\lambda \rightarrow 0). \quad (3.73)$$

Die Einsteinrelation (2.85) ist also für subohmsche Dissipation gültig. Dies entspricht der allgemeinen Aussage über die Gültigkeit der Einsteinrelation im Tight-Binding-Gitter für $s < 2$ in [39].

3.4 Übersicht über die Parameterbereiche

Anhand der formal exakten Ausdrücke (3.36) und (3.35) für die ersten beiden Momente wurden eine Reihe weiterer Ergebnisse erhalten. Insbesondere ist dabei der Beweis der Gültigkeit der Einsteinrelation für $s < 2$ und allgemeine Aussagen über das qualitative Verhalten der Mobilität für $T \rightarrow 0$ zu erwähnen. Einen Großteil der Ergebnisse findet man in der grundlegenden Arbeit [39].

Der Beweis der Einsteinrelation stützt sich auf die analytische Eigenschaften der Funktion $Q(t)$. Mittels einer geeigneten Umparameterisierung läßt sich eine Art detaillierter Balance von Transportprozessen in entgegengesetzter Richtung zeigen.

Für ohmsche Dissipation faktorisieren im Fall kleiner α neutrale Cluster, sofern die Temperatur nicht zu klein ist. So gelangt man zu einem Kettenbruch für die nichtlineare Mobilität beziehungsweise zu analytischen Ergebnissen für kleine Kräfte.

Für $\alpha = 1/2$ trägt nur eine bestimmte Klasse neutraler Cluster zu den Wegen bei. In diesem Fall, der klassisch gerade dem Grenzfall einer asymptotisch gedämpften Bewegung entspricht, erhält man ein analytisches Ergebnis für das erste Moment als Funktion der Kraft und der Temperatur mit Gültigkeit im gesamten Parameterbereich und für beliebige Zeiten.

Im Hochtemperaturlimes ist die Dynamik durch eine Mastergleichung beschreibbar, die nur inkohärente Tunnelprozesse berücksichtigt. Ihre Lösung ist analytisch bekannt und kann über die DBGA-Näherung nicht miteinander wechselwirkender Blips berechnet werden. Blips sind Instanton-Antiinstantonpaare in der Offdiagonalkoordinaten y . Sie tragen bei hohen Temperaturen allein zum Pfadintegral bei, da Wege, die weit von der Diagonalen wegführen, durch den Imaginärteil der Influenzphase Φ unterdrückt werden. Das Bad zerstört also die Kohärenzen.

Die Hochtemperaturnäherung konvergiert für $\alpha > 1$ im gesamten Temperaturbereich und ist auch für sehr kleine Temperaturen durchführbar. Dies führt zu einer verschwindenden Mobilität des Teilchens bei $T = 0$. Ein anderer Sachverhalt liegt für $\alpha < 1$ vor. Hier gibt es eine Übergangstemperatur $T^*(\alpha)$, bei deren Unterschreiten der Hochtemperaturausdruck divergiert. Unterhalb von T^* bestimmen daher quantenmechanische Effekte das Systemverhalten. Dies schlägt sich insbesondere in der Delokalisierung des Teilchens für $T = 0$ nieder, aus der eine nichtverschwindende Mobilität folgt [25, 64, 90]. Sie ist für kleine Kräfte durch die des freien Brownschen Teilchens gegeben.

Bei sehr kleinen Temperaturen zeigt die Mobilität ein universelles Verhalten, das im ohmschen Fall zu Korrekturtermen der Ordnung T^2 führt [39, 91].

Die Tabelle gibt einen groben Überblick über Ergebnisse und Methodiken in verschiedenen Parameterbereichen.

	1. Moment $\langle \hat{q}(t) \rangle$				2. Moment $\langle \hat{q}^2(t) \rangle$
	T endl.	$T \gg T^*$	$T \rightarrow 0$	$T = 0$	
$s < 1$	Freies Brownsche Teilchen, $\sim t^s$				Einstein- relation
$\alpha \ll 1$	μ_l analyt.	DBGA	analyt. Ergebnis nicht gültig	$\mu_l = \mu_0$	
$\alpha = 1/2$	analyt.	analyt.	analytisch	$\mu_l = \mu_0$	
$\alpha < 1$	$\sim t$	DBGA	DBGA divergiert	$\mu_l = \mu_0$	
$s = 1$	$\sim t$	DBGA	$\mu = \mu(T=0) + AT^2$		
$\alpha > 1$	$\sim t$	DBGA	DBGA konvergiert	$\mu = 0$	
$1 < s < 2$	$\sim t$			$\mu = 0$	

Kapitel 4

Nichtlineare subohmsche Dynamik im Tight–Binding–Modell

In diesem Kapitel wird das subohmsche erste Moment für beliebige Kräfte behandelt. Ausgangspunkt der Betrachtungen ist der Ausdruck (3.44)

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= \frac{q_0}{2} \frac{1}{\lambda^2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \Delta^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{1,2m-1}\} \sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'} \sin\left(\sigma \sum_{j=1}^{2m} g_{j,2m}\tau_j\right) \\
 &\quad \times \exp\left(\sum_{j>i} \xi_i \xi_j Q_2(\tau_{i,j-1})\right) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin\left(\sum_{j=i+1}^{2m} \xi_j Q_1(\tau_{i,j-1})\right) \\
 &= \frac{q_0}{2} \frac{1}{\lambda^2} n_{\sigma}(\lambda)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

für das erste Moment nach Einführung der Differenzzeiten und Laplacetransformation, in dem der Bias–Term jedoch nicht für kleine Kräfte linearisiert wurde. Für subohmsche spektrale Dichten divergieren die Differenzzeitintegrale über solche Zeiten τ_{2k_i} , für die $g_{2k_i,2m} = 0$ gilt. Dies haben wir im vorigen Kapitel gesehen. Die dort vorgestellte Methode der Faktorisierung um die letzte dieser Nullstellen–Differenzzeiten τ_{2k_s} kann auch zur Bestimmung von $n_{\sigma}(\lambda)$ herangezogen werden.

Wir benutzen die Größen a_m (3.37), H_m (3.27) und G_m (3.24). Die Faktorisierung von

$$a_m = a_{k_s} \cdot a_{m-k_s} \cdot f_{m-k_s} \tag{4.2}$$

mit

$$f_{m-k_s} = \dot{Q}_1(t_{2k_s}) \sum_{j=2k_s+1}^{2m} g_{j,2m}\tau_j \tag{4.3}$$

und

$$H_m = H_{k_s} \cdot H_{m-k_s} \tag{4.4}$$

überträgt sich direkt. Für G_m hingegen gilt nun

$$\begin{aligned}
G_m &= \sin \left(\sigma \sum_{j=1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j \right) \\
&= \sin \left(\sigma \sum_{j=1}^{2k_s} g_{j,2k_s} \tau_j \right) \cos \left(\sigma \sum_{j=2k_s+1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j \right) \\
&+ \cos \left(\sigma \sum_{j=1}^{2k_s} g_{j,2k_s} \tau_j \right) \sin \left(\sigma \sum_{j=2k_s+1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j \right) \\
&= G_{k_s} \cdot I_{m-k_s} + I_{k_s} \cdot G_{m-k_s} .
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Durch Addition des partiell gespiegelten Weges fällt der zweite Term dieser Zerlegung weg. Dies erkennt man unter der Berücksichtigung, daß a_{m-k_s} , f_{m-k_s} sowie G_{m-k_s} dabei jeweils ein Minuszeichen liefern, I_{m-k_s} hingegen nicht. Desweiteren gilt die Beziehung

$$\dot{Q}_1(t_{2k_s}) \frac{\partial G_{m-k_s}}{\partial \sigma} = I_{m-k_s} f_{m-k_s} . \tag{4.6}$$

Die Integrationen der Zeiten bis zum Index $2k_s - 1$ liefern somit den gesuchten Ausdruck $n_\sigma(\lambda)$. Die Integration über τ_{2k_s} ergibt für den Faktorisierungsterm

$$f(\lambda) = \lambda Q_1(\lambda) , \tag{4.7}$$

während die restlichen Integrationen auf die Ableitung des konvergierenden Terms $n_\sigma^{(k)}(\lambda)$ nach dem Bias σ führen. Wie $n_\sigma^{(k)}(\lambda)$ ist auch die Ableitung nach σ für $\lambda \rightarrow 0$ konvergent. Insgesamt ergibt sich so die Gleichung

$$n_\sigma(\lambda) = n_\sigma^{(k)}(\lambda) - n_\sigma(\lambda) f(\lambda) \frac{\partial}{\partial \sigma} n_\sigma^{(k)}(\lambda) . \tag{4.8}$$

Somit ist

$$\begin{aligned}
n_\sigma(\lambda) &= \frac{n_\sigma^{(k)}(\lambda)}{1 + f(\lambda) \frac{\partial}{\partial \sigma} n_\sigma^{(k)}(\lambda)} \\
&= \frac{n_\sigma^{(k)}(\lambda)}{f(\lambda) \frac{\partial}{\partial \sigma} n_\sigma^{(k)}(\lambda)} \left[1 - \left(f(\lambda) \frac{\partial}{\partial \sigma} n_\sigma^{(k)}(\lambda) \right)^{-1} \right] + \mathcal{O}(\lambda^{3-3s}) .
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Für kleine Kräfte ist $n_\sigma(\lambda) \approx \sigma n_1(\lambda)$ mit $n_1(\lambda)$ aus (3.63). Damit gewinnt man das Resultat für das linearisierte Moment zurück.

Dieses Ergebnis läßt sich aber noch verallgemeinern¹. Führt man neben der Faktorisierung bei der letzten Interclusterdifferenzzeit die selbe Prozedur auch bei der ersten durch, so erhält man eine weitere Gleichung

$$n_\sigma(\lambda) = n_\sigma^{(k)}(\lambda) - n_\sigma^{(k)}(\lambda) f(\lambda) \frac{\partial}{\partial \sigma} n_\sigma(\lambda) , \tag{4.10}$$

¹Der folgende Abschnitt basiert auf Zusammenarbeit mit Dr. Th. Negele.

die zusammen mit (4.8) als ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung bezüglich der Variablen σ aufgefaßt werden kann, welches sich zur Bestimmung von $n^{(k)}(\sigma)$ und $n(\sigma)$ heranziehen läßt. Es liefert zunächst $n^{(k)}(\sigma) \sim n(\sigma)$ und weiter

$$\frac{\partial^2 n(\sigma)}{\partial \sigma^2} = 0 . \quad (4.11)$$

Somit ist die Form des nichtlinearen ersten Momentes im subohmschen Regime für beliebig große Kräfte mit der des linearen Momentes (3.67) identisch und durch

$$\langle \hat{q}(t) \rangle = \frac{\hbar \sigma}{q_0 \eta_s} \frac{\sin(s\pi/2)}{\Gamma(1+s)} t^s \quad (t \rightarrow \infty) \quad (4.12)$$

gegeben.

Kapitel 5

Quantendiffusion im Cosinuspotential

In diesem Kapitel wenden wir uns der Dynamik eines Teilchens zu, das sich in einem Cosinuspotential bewegt. Dabei werden wir erneut zu formal exakten Ergebnissen gelangen, die in ihrer Struktur denen des Tight-Binding-Modells ganz ähnlich sind [38], [40]–[42], [65]. Dadurch wird es möglich sein, eine Abbildung zwischen den Ausdrücken der beiden Modelle zu finden [33, 34, 64, 65]. Diese Dualitätstransformation ist Inhalt des anschließenden Kapitels 6.

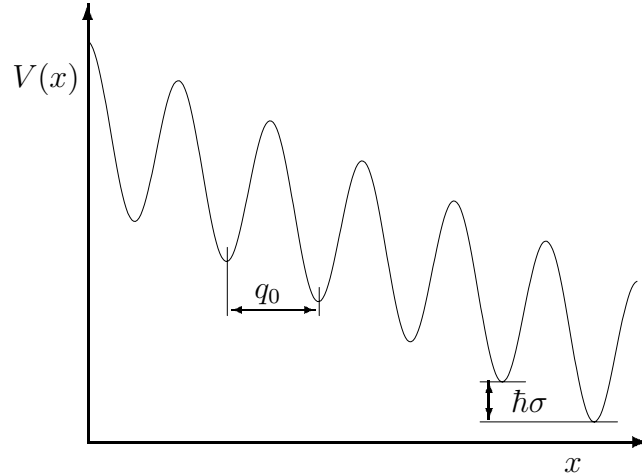


Abbildung 5.1: Gekipptes Cosinuspotential mit Bias $\sigma = Fq_0/\hbar$

Der Hamiltonian des Systems lautet

$$\begin{aligned} H(q, p, \{x_i\}, \{p_i\}) & \\ &= \frac{1}{2m}p^2 + V \cos(k_0q) - Fq + \sum_i \left\{ \frac{1}{2m_i}p_i^2 + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i(q)q}{m_i\omega_i^2} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Das gekippte Cosinuspotential ist in der Abbildung (5.1) veranschaulicht.

5.1 Durchführung der Pfadintegration

Zunächst formen wir das Influenzfunktional (2.161) der propagierenden Funktion $J(q_f, q'_f, t; q_i, q'_i, 0)$ so um, daß das Pfadintegral durchführbar wird. Dabei folgen wir den Arbeiten von Chen, Lebowitz und Liveriani [38] und Chen und Lebowitz [41].

Durch partielle Intergration läßt sich die Influenzphase (2.162, 2.163) in eine dem Problem angepaßte Form bringen. Sie lautet dann

$$\Phi'[x, y] = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau \left[\int_0^\tau ds y(\tau) \eta(\tau - s) \dot{x}(s) + y(\tau) \eta(\tau) x_i \right]; \quad (5.2)$$

$$\Phi''[y] = \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds y(\tau) K_1(\tau - s) y(s). \quad (5.3)$$

Die Größen

$$K_1(\tau) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) \cos(\omega\tau) \quad (5.4)$$

und

$$\eta(\tau) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega\tau) \quad (5.5)$$

sind schon bei der Behandlung der Langevingleichung aufgetreten.

In $\Phi''[y]$ tritt $y(t)$ quadratisch auf. Durch Einführung einer Ensemblemittelung über die Rauschkraft $\xi(t)$ erhält man eine Form, in der $y(t)$ linear auftritt:

$$\exp(-\Phi''[y]) = \left\langle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau y(\tau) \xi(\tau)\right) \right\rangle_\xi. \quad (5.6)$$

Diese Beziehung kann man verifizieren, indem man auf beiden Seiten die Exponentialfunktion entwickelt. Dabei treten höhere Korrelationsfunktionen der Rauschkraft auf. Für einen Gauß-Prozeß verschwinden ungerade Korrelationsfunktionen, während gerade Korrelationen nach

$$\left\langle \prod_{i=1}^n \xi(t_i) \right\rangle = \mathcal{P} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle \cdots \langle \xi(t_{n-1}) \xi(t_n) \rangle \quad (n \text{ gerade}) \quad (5.7)$$

faktorisieren. Durch die Wirkung des Permutationsoperators \mathcal{P} , der alle Anordnungen der Zeiten mit verschiedenem Resultat erzeugt, erhält man $\frac{n!}{2^{n/2}(n/2)!}$ Terme. Etwas abstrakter handelt es sich bei der Beziehung um eine Stratonovich-Umformung. Die Ensemblemittelung entspricht einem Funktionalintegral über alle Rauschkrafttrajektorien $\xi(t)$ mit einem Gaußschen Filterfunktional

$$\exp\left\{-\frac{1}{2\hbar} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \xi(t') K_1^{-1}(t' - t'') \xi(t'')\right\} \quad (5.8)$$

als Maß, in dem die Kovarianz $K_1(t)$ (2.25) auftritt. Bei Durchführung der Ensemblemittelung erhält man durch quadratisches Ergänzen den in $y(t)$ bilinearen Term zurück.

Es verbleibt noch die durch das Cosinuspotential verursachte Nichtlinearität der Wirkung. Zunächst benutzen wir

$$\cos\left(k_0\left(x - \frac{1}{2}y\right)\right) - \cos\left(k_0\left(x + \frac{1}{2}y\right)\right) = 2 \sin(k_0x) \sin\left(\frac{1}{2}k_0y\right). \quad (5.9)$$

Nun entwickeln wir in mehreren Schritten den Potentialterm

$$\begin{aligned} & \exp\left\{\frac{2i}{\hbar}V \int_0^t dt' \sin(k_0x(t')) \sin\left(\frac{1}{2}k_0y(t')\right)\right\} \quad (5.10) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2iV}{\hbar}\right)^n \prod_{i=1}^n \left[\int_0^t \frac{dt_i}{n!} \sin(k_0x(t_i)) \sum_{\sigma_i=\pm 1} \frac{1}{2i} \sigma_i \exp\left(i\frac{y(t_i)}{2}k_0\sigma_i\right)\right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \prod_{i=1}^n \left[\sin(k_0x(t_i)) \sigma_i \exp\left(i\frac{y(t_i)}{2}k_0\sigma_i\right)\right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \prod_{i=1}^n [\sin(k_0x(t_i)) \sigma_i] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{\rho}(\tau) y(\tau)\right) \end{aligned}$$

mit der in der letzten Zeile neu eingeführten Ladungsdichte

$$\tilde{\rho}(\tau) = \sum_j \sigma_j \frac{\hbar k_0}{2} \delta(\tau - t_j). \quad (5.11)$$

Hierbei bezeichnet $\int \mathcal{D}_n[t]$ die in (3.22) definierte zeitgeordnete Integration. Mit ihrer Einführung wird auch der Faktor $1/n!$ kompensiert. Im Exponenten der letzten Zeile steht nun ein Term, der sich zur bisherigen Wirkung addiert und in dem $y(t)$ nur linear vorkommt. Dafür haben wir durch die Entwicklung der Sinusterme eine Kombinatorik über $\{\sigma_i\}$ erhalten. Sie unterliegt noch keinen Randbedingungen. Der Propagator hat nun die folgende Form:

$$\begin{aligned} & J(q_1^f, q_2^f, t; q_1^i, q_2^i, 0) \quad (5.12) \\ &= \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int \mathcal{D}x \int \mathcal{D}y \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \dot{x} y|_i^f\right) \prod_{i=1}^n \sigma_i \sin(k_0x(t_i)) \right. \\ & \quad \left. \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau y(\tau) \left[-m\ddot{x}(\tau) + \tilde{\rho}(\tau) + \xi(\tau) - \eta(\tau)x_i - \int_0^\tau ds \eta(\tau - s)\dot{x}(s)\right]\right\} \right\rangle_\xi. \end{aligned}$$

Das effektive Wirkungsfunktional ist nun linear in $y(t)$. Das Pfadintegral über die Nebendiagonalwege ist somit durchführbar. In der diskretisierten Form erhält man für jede Integration über $y(t_k)$ eine δ -Funktion, deren Argument

$$f[x(t_k)] = \frac{t_{k+1} - t_k}{\hbar} \left(-m\ddot{x}(t_k) + \tilde{\rho}(t_k) + \xi(t_k) - \eta(t_k)x_i - \int_0^{t_k} ds \eta(t_k - s)\dot{x}(s)\right) \quad (5.13)$$

einer Klasse verallgemeinerter Langevin–Gleichungen mit einer zusätzlichen δ -förmige Kraft $\tilde{\rho}(t)$ entspricht, die über diesen Term von der Kombinatorik über $\{\sigma_i\}$ abhängen. Die zugehörigen Lösungen $x_n(t)$ werden im folgenden mit der Zahl n der in ihnen beinhalteten δ -Pulse charakterisiert. Das Auftreten des Terms $\eta(t_k)x_i$ ist darauf zurückzuführen, daß das Bad im Rahmen der Faktorisierungsannahme mit dem im Ursprung sitzenden Teilchen relaxiert ist, das Teilchen selber jedoch quantenmechanisch auch an anderen Orten starten kann.

Die x -Trajektorien des Pfadintegrals sind nun auf die Lösungen von (5.13) festgelegt. Es verbleibt also

$$J(q_1^f, q_2^f, t; q_1^i, q_2^i, 0) \quad (5.14)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int \mathcal{D}x \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_j\}} \left\langle \delta^\infty(f[x]) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}m(\dot{x}_i y_i - \dot{x}_f y_f)\right\} \prod_{j=1}^n \sigma_j \sin(k_0 x(t_j)) \right\rangle_\xi.$$

Um das Pfadintegral endgültig zu lösen, benötigt man die Jacobische Determinante

$$D = \left(\frac{\partial f[x]}{\partial [x]}\right)^{-1}. \quad (5.15)$$

Sie gibt eine Art Dichte der Lösungen von (5.13) im Funktionenraum an. Um D zu erhalten, geht man erneut in eine diskretisierte Form über und leitet eine Differentialgleichung her. Dies ist im Anhang A durchgeführt. Man erhält das Ergebnis

$$D = \frac{2\pi\hbar}{m} \frac{\partial x_f}{\partial \dot{x}_i}. \quad (5.16)$$

Nach Einführung einer weiteren Integration über den Impuls $p_i = m\dot{x}_i$ lautet der Propagator schließlich

$$J(q_1^f, q_2^f, t; q_1^i, q_2^i, 0) \quad (5.17)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int dp_i \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_j\}} \left\langle \delta(x_f - x_n(t)) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}m\dot{x}_i y_i\right\} \prod_{j=1}^n \sigma_j \sin(k_0 x_n(t_j)) \right\rangle_\xi.$$

Mit der Definition des Wignerfunktional

$$W(x, p, t) = \int dy \rho\left(x + \frac{1}{2}y, x - \frac{1}{2}y, t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}yp\right) \quad (5.18)$$

läßt sich das Ergebnis wie folgt formulieren:

$$W(x_f, p_f, t) = \left\langle \int dx_i \int dp_i \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_j\}} \delta(x_f - x_n(t)) \delta(p_f - p_n(t)) \right. \\ \left. \times \prod_{j=1}^n \sigma_j \sin(k_0 x_n(t_j)) W(x_i, p_i, 0) \right\rangle_\xi. \quad (5.19)$$

Das Wignerfunktional ist keine positiv definite Größe, gehorcht aber im klassischen Limes der Fokker–Planck–Gleichung für die Phasenraumdichte im auf die Teilchenkoordinaten reduzierten Phasenraum [26].

Im folgenden werden wir die Mittelung über die Ausgangspräparation $W(x_i, p_i, 0)$ nicht mehr explizit aufführen und sie in die Definition der Mittelung $\langle \rangle$ einbeziehen, da wir von einer lokalisierten Ausgangspräparation ausgehen, deren genaue Form für das Verhalten nach großen Zeiten keine Bedeutung mehr haben soll. Die erhaltenen Ausdrücke verdeutlichen, daß die gesamte Dynamik durch die Lösungen $x_n(t)$ der generalisierten Langevingleichung (5.13) und der darin enthaltenen Kombinatorik über $\{\sigma_i\}$ sowie die Mittelung über die stochastische Rauschkraft $\xi(t)$ gegeben ist.

5.2 Das erzeugende Funktional

Der Erwartungswert einer von x und p abhängigen Observablen $f(x, p)$ hat im Wignerfunktionalformalismus die Form

$$\langle f(\hat{x}(t), \hat{p}(t)) \rangle = \int W(x, p, t) f(x, p) dx dp . \quad (5.20)$$

Das erzeugende Funktional liest sich dann nach Abspaltung des Terms $n = 0$ als

$$\begin{aligned} Z^{(\text{wc})}(\kappa, t) &= \langle \exp(i\kappa \hat{q}(t)) \rangle \\ &= \langle \exp(i\kappa x_0(t)) \rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{V}{\hbar} \right)^n \left\langle \int_0^t \mathcal{D}_n[t] \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(i\kappa x_n(t)) \prod_{i=1}^n \sigma_i \sin(k_0 x_n(t_i)) \right\rangle . \end{aligned} \quad (5.21)$$

Dieser Ausdruck läßt sich noch weiter umformen. Dazu schreiben wir die Lösungen der Gleichung (5.13) mit Hilfe der Greenschen Funktion $g(t)$ aus (2.96) in allgemeiner Form hin:

$$x_n(t) = x_0(t) + \frac{\hbar k_0}{2} \sum_{i=1}^n \sigma_i g(t - t_i) \quad (5.22)$$

mit

$$\begin{aligned} x_0(t) &= x_{\xi}(t) && + x_{\text{F}}(t) && + x_i(t) \\ &= \int_0^t ds \xi(s) g(t - s) + \int_0^t ds F g(t - s) + x_i + \frac{p_i}{m} g(t) + x_i \int_0^t ds \eta(s) g(t - s) . \end{aligned} \quad (5.23)$$

Dies ist die Lösung der Langevingleichung für ein freies Brownsches Teilchen. Sie setzt sich aus der Antwort $x_{\xi}(t)$ auf die Rauschkraft $\xi(t)$, der Antwort $x_{\text{F}}(t)$ auf die äußere Kraft F und dem von den Anfangsbedingungen herrührenden Beitrag $x_i(t)$ zusammen.

Als nächstes entwickeln wir auch die restlichen Sinusterme und erhalten dadurch eine weitere Kombinatorik, können aber anschließend die Summation über $\{\sigma_i\}$ durchführen. Das Ziel dieses Vorgehens ist es, zu einem Ausdruck zu gelangen, der eine dem erzeugenden Funktional des Tight-Binding-Modells analoge Gestalt hat. Für die von $\{\sigma_i\}$ abhängigen Terme ist dann

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(i\kappa x_n(t)) \prod_{i=1}^n \sigma_i \sin(k_0 x_n(t_i)) \\
&= \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ i\kappa x_0(t) + i\kappa \frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j g(t - t_j) \right\} \\
&\quad \times \prod_{i=1}^n \frac{\sigma_i}{2} \exp \left\{ -i\frac{\pi}{2} \mu_i + ik_0 \mu_i x_0(t_i) + i\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j g(t_i - t_j) \mu_i \right\} \\
&= \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ i\kappa x_0(t) + i\kappa \frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j g(t - t_j) \right\} \\
&\quad \times \left(\prod_{i=1}^n \frac{\sigma_i}{2} \exp \left\{ i\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j g(t_i - t_j) \mu_i \right\} \right) \exp \left\{ i \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\pi}{2} \mu_i + k_0 \mu_i x_0(t_i) \right) \right\} \\
&= \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ i\kappa x_0(t) + i \sum_{i=1}^n \mu_i \left(-\frac{\pi}{2} + k_0 x_0(t_i) \right) \right\} i^n \\
&\quad \times \prod_{i=1}^n \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \mu_j g(t_j - t_i) + \kappa \frac{\hbar k_0}{2} g(t - t_i) \right) \\
&= \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ i\kappa (x_i(t) + x_\xi(t) + x_F(t)) - i \sum_{i=1}^n \mu_i \frac{\pi}{2} \right\} \\
&\quad \times \exp \left\{ ik_0 \sum_{i=1}^n \mu_i (x_i(t_i) + x_\xi(t_i) + x_F(t_i)) \right\} \\
&\quad \times i^n A_m^{(\text{wc})}(\kappa) . \tag{5.24}
\end{aligned}$$

Dabei steht in der letzten Zeile $A_m^{(\text{wc})}(\kappa)$ für

$$A_m^{(\text{wc})}(\kappa) = \prod_{i=1}^n \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j=1}^n \mu_j g(t_j - t_i) + \kappa \frac{\hbar k_0}{2} g(t - t_i) \right) . \tag{5.25}$$

Im letzten Schritt haben wir $x_0(t)$ eingesetzt. Während der ganzen Umformung haben wir der Übersichtlichkeit wegen in allen Summen von 1 bis n summiert, selbst da, wo Terme wegen $g(t) = 0$ für $t < 0$ verschwinden.

An dieser Stelle läßt sich durch Betrachtung des Langzeitlimes eine Aussage treffen, die für das weitere Vorgehen von Bedeutung ist. Zunächst entledigen wir uns

der Mittelung über die stochastische Kraft $\xi(t)$ genau auf dem Weg, auf dem sie eingeführt wurde. Mit der Definition der Größe $C(t)$ in (2.95) erhält man

$$\begin{aligned}
& \left\langle \exp \left(i\kappa x_\xi(t) + ik_0 \sum_{i=1}^n \mu_i x_\xi(t_i) \right) \right\rangle \quad (5.26) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \left\langle \left(\kappa x_\xi(t) + k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i x_\xi(t_i) \right)^2 \right\rangle \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \kappa^2 \langle x_\xi^2(t) \rangle - \frac{1}{2} \left\langle \left(k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i x_\xi(t_i) \right)^2 \right\rangle - \left\langle \kappa k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i x_\xi(t_i) x_\xi(t) \right\rangle \right) \\
&\stackrel{t \rightarrow \infty}{=} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \kappa^2 \langle x_\xi(t)^2 \rangle + \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j=1}^n \mu_i \mu_j C(t_i - t_j) - \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j=1}^n \mu_i \mu_j \langle x_\xi^2(t_i) \rangle \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \kappa k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i \langle x_\xi^2(t_i) \rangle - \frac{1}{2} \kappa k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i \langle x_\xi^2(t) \rangle + \kappa k_0 \sum_{i=1}^n \mu_i C(t - t_i) \right\}.
\end{aligned}$$

Für $\sum_i \mu_i \neq 0$ wird dieser Ausdruck für lange Zeiten exponentiell unterdrückt. Daher tragen nur Kombinationen mit $\sum_i \mu_i = 0$ bei. Erst dadurch werden die Ergebnisse von Tight-Bindung-Modell und Cosinuspotential miteinander vergleichbar. Damit ist zudem n gerade. Wir benutzen daher ab hier $n = 2m$. Mit der neuen Nebenbedingung fallen aber auch im letzten Ausdruck einige Terme weg. Ebenso kann $\sum_i \mu_i x_i(t_i)$ als Term niedriger Ordnung vernachlässigt werden.

Damit lautet schließlich das erzeugende Funktional

$$\begin{aligned}
Z^{(\text{wc})}(\kappa, t) &= Z_0(\kappa, t) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\mu_i\}} \quad (5.27) \right. \\
&\quad \times \prod_{i=1}^{2m} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(t_j - t_i) + \frac{\hbar \kappa k_0}{2} g(t - t_i) \right) \\
&\quad \times \exp \left\{ ik_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j F \int_0^{t_j} d\tau g(\tau) + \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(t_i - t_j) \right\} \\
&\quad \left. \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \kappa k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j \langle x_\xi^2(t_j) \rangle + \kappa k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j C(t - t_j) \right\} \right]
\end{aligned}$$

oder auch

$$Z^{(\text{wc})}(\kappa, t) = Z_0(\kappa, t) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\mu_i\}} \prod_{i=1}^{2m} A_m^{(\text{wc})}(\kappa) B_m^{(\text{wc})}(\kappa) G_m^{(\text{wc})} H_m^{(\text{wc})} \right] \quad (5.28)$$

mit $A_m^{(\text{wc})}(\kappa)$ aus (5.25) und

$$B_m^{(\text{wc})}(\kappa) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \kappa k_0 \sum_j \mu_j \langle x_\xi^2(t_j) \rangle + \kappa k_0 \sum_j \mu_j C(t - t_j) \right\}; \quad (5.29)$$

$$G_m^{(\text{wc})} = \exp \left\{ ik_0 \sum_j^{2m} \mu_j F \int_0^{t_j} d\tau g(\tau) \right\}; \quad (5.30)$$

$$H_m^{(\text{wc})} = \exp \left\{ \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(t_i - t_j) \right\} \quad (5.31)$$

sowie dem erzeugende Funktional der Bewegung des freien Brownschen Teilchens

$$Z_0(\kappa, t) = \exp(i\kappa x_0(t)) = \exp \left\{ i\kappa \left[x_i(t) + F \int_0^t d\tau g(\tau) \right] - \frac{1}{2} \kappa^2 \langle x_\xi^2(t) \rangle \right\}. \quad (5.32)$$

Die gleichzeitige Ersetzung $\kappa \rightarrow -\kappa$ und $\mu_i \rightarrow -\mu_i$ ergibt für $F = 0$ die Beziehung $Z(\kappa) = Z(-\kappa)$. An ihr erkennt man, daß für verschwindende Kraft alle ungeraden Momente verschwinden, wie es selbstverständlich der Fall sein muß.

Der Vergleich zwischen dem erzeugenden Funktional des Tight-Binding-Modells (3.30) mit dem Ausdruck (5.27) ergibt, daß beide Ausdrücke eine ähnliche Struktur haben. Diese wird die Grundlage für die Dualitätstransformation geben.

5.3 Das erste und das zweite Moment

Das erste Moment für große Zeiten folgt aus (5.27) zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(t) \rangle &= \left. \frac{\partial Z(\kappa)}{\partial(i\kappa)} \right|_{\kappa=0} \\ &= \int_0^t ds F g(s) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(t - t_{2m}) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(t_j - t_i) \right) \\ &\times \exp \left\{ \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(t_i - t_j) \right\} \sin \left(k_0 \sum_j \mu_j F \int_0^{t_j} d\tau g(\tau) \right), \quad (5.33) \end{aligned}$$

das zweite Moment lautet für $F = 0$

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}^2(t) \rangle &= \left. \frac{\partial^2 Z(\kappa)}{\partial(i\kappa)^2} \right|_{\kappa=0} \\ &= \langle x_\xi^2(t) \rangle - \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^t \mathcal{D}_{2m}[t] \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(t - t_{2m}) \\ &\times \left[\sum_{k=1}^{2m-1} \hbar k_0 g(t - t_k) \cot \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>k} \mu_j g(t_j - t_k) \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +2k_0 \sum_{l=1}^{2m} \mu_l C(t-t_l) - k_0 \sum_{l=1}^{2m} \mu_l \langle x_\xi^2(t_l) \rangle \Big] \\
& \times \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(t_j - t_i) \right) \exp \left\{ \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(t_i - t_j) \right\}. \quad (5.34)
\end{aligned}$$

Wie schon beim Tight-Binding-Gitter ist es sinnvoll, Differenzzeiten einzuführen und zu den laplacetransformierten Ausdrücken überzugehen. Man erhält

$$\begin{aligned}
\langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= \frac{F}{\lambda} g(\lambda) \quad (5.35) \\
&+ \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{D}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \\
&\times \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \\
&\times \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(\tau_{i,j-1}) \right\} \sin \left(k_0 \sum_j \mu_j F \int_0^{\tau_{0,j-1}} d\tau g(\tau) \right)
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
\langle \hat{q}^2(\lambda) \rangle &= \langle x_\xi^2(\lambda) \rangle - \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \sum_{\{\mu_i\}} \int_0^{\infty} \hat{D}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \\
&\times \left[\sum_{k=1}^{2m-1} \hbar k_0 g(\tau_{k,2m}) \cot \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>k} \mu_j g(\tau_{k,j-1}) \right) \right. \\
&\quad \left. + 2k_0 \sum_{l=1}^{2m} \mu_l C(\tau_{l,2m}) - k_0 \sum_{l=1}^{2m} \mu_l \langle x_\xi^2(\tau_{0,l-1}) \rangle \right] \\
&\times \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(\tau_{i,j-1}) \right\}. \quad (5.36)
\end{aligned}$$

Dem Verhalten dieser formal exakten Ausdrücke für subohmsche, ohmsche und superohmsche Dissipation werden wir uns im übernächsten Kapitel zuwenden. Nun kommen wir zur Dualitätstransformation.

Kapitel 6

Die Dualitätstransformation

Die Dualitätstransformation ist eine Abbildung der Parameter und Momente zwischen Tight-Binding-Potential und Cosinuspotential. Eine derartige Beziehung wurde zuerst von Schmid [64] für $T = 0$ bei ohmscher Dissipation bemerkt und genutzt. Fisher und Zwerger [65] dehnten sie auf die Realzeitdynamik bei endlichen Temperaturen unter ohmscher Dissipation aus und betrachteten zunächst das erste Moment. Chen, Lebowitz und Liveriani [38] betrachteten das zweite Moment für ohmsche Dissipation, Chen [40] zeigte daran anschließend die Gültigkeit der Einsteinrelation im Cosinuspotential. Zu Beginn diskutieren wir den Fall ohmscher spektraler Dichten, wie er in der Literatur [38, 65] bisher behandelt worden ist. Dort erfolgt die Aufstellung der Dualitätstransformation anhand der formal exakten Ausdrücke aus den Kapiteln 3 und 5. Anschließend erweitern wir die Abbildung des Bades durch Vergleich dieser Ausdrücke auf nichtohmsche spektrale Dichten. In Kapitel 8 wenden wir uns der direkten Abbildung der beiden Systeme aufeinander zu, ohne auf die formal exakten Ausdrücke zurückzugreifen. Dabei werden wir erneut auf eine Abbildung der Bäder geführt, die mit der zuvor erlangten übereinstimmt.

6.1 Der Fall ohmscher Dissipation

Ausgangspunkt der Betrachtungen sind die ersten beiden Momente der Bewegung in den beiden Modellpotentialen. Sie gleichen sich insbesondere in der Struktur der konvergenzerzeugenden Phasenfaktoren.

Für strikt ohmsche Dissipation

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \eta\omega \tag{6.1}$$

im Cosinuspotential¹ sind die Greensche Funktion $g(t)$ und die symmetrisierte Gleichgewichtskorrelationsfunktion $C(t)$ nach (2.97), (2.98) und (2.100) durch

$$\begin{aligned}\frac{\hbar k_0^2}{2}g(t) &= \frac{\hbar k_0^2}{\pi}\Theta(t)\int_0^\infty d\omega \frac{\eta\omega}{m^2\omega^2(\omega^2+\gamma^2)}\sin(\omega t) \\ &= \Theta(t)\frac{\pi}{\alpha}(1-\exp(-\gamma t))\end{aligned}\quad (6.2)$$

und

$$\begin{aligned}\frac{k_0^2}{2}C(t) &= \frac{\hbar k_0^2}{2\pi}\int_0^\infty d\omega \frac{\omega}{m\gamma\omega^2(1+\omega^2/\gamma^2)}\coth(\hbar\beta\omega/2)[1-\cos(\omega t)] \\ &= \frac{1}{\alpha}\int_0^\infty d\omega \frac{\omega}{\omega^2(1+\omega^2/\gamma^2)}\coth(\hbar\beta\omega/2)[1-\cos(\omega t)]\end{aligned}\quad (6.3)$$

gegeben.

Dabei haben wir den dimensionslosen Kondoparameter

$$\alpha = \frac{\eta q_0^2}{2\pi\hbar} = \frac{2\pi\eta}{\hbar k_0^2}\quad (6.4)$$

benutzt und die Größen mit den Konstanten multipliziert, die auch in den Phasenfaktoren der formal exakten Ausdrücke des letzten Kapitels auftreten. Im Langzeitlimites lautet somit das erste Moment nach (5.33)

$$\begin{aligned}\langle\hat{q}(t)\rangle_{\text{wc}} &= \frac{F}{\eta}t + \frac{1}{2}\frac{q_0}{\alpha}\sum_{m=1}^\infty\left(\frac{iV}{\hbar}\right)^{2m}\int_0^t\mathcal{D}_{2m}[t]\sum_{\{\mu_i\}}\prod_{i=1}^{2m-1}\sin\left(k_0\sum_{j>i}\mu_j g(t_j-t_i)\right) \\ &\times \exp\left\{\frac{k_0^2}{2}\sum_{i,j}\mu_i\mu_j C(t_i-t_j)\right\}\sin\left(k_0\sum_j\mu_j F\int_0^{t_j}d\tau g(\tau)\right).\end{aligned}\quad (6.5)$$

Im Tight-Binding-Potential haben wir in (3.35) den Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle\hat{q}(t)\rangle_{\text{tb}} &= \frac{q_0}{2}\sum_{m=1}^\infty(-1)^{m-1}\Delta^{2m}\int_0^t\mathcal{D}_{2m}[t]\sum_{\{\xi_j=\pm 1\}'}\sin\left(\sigma\sum_{j=1}^{2m}\xi_j t_j\right) \\ &\times \exp\left(\sum_{i>j}\xi_i\xi_j Q_2(t_i-t_j)\right)\prod_{j=1}^{2m-1}\sin(\eta_{j,2m})\end{aligned}\quad (6.6)$$

erhalten. Beide Ausdrücke haben eine sehr ähnliche Struktur. Um eine Abbildung zwischen ihnen zu finden, setzen wir zunächst²

$$q_0 = \frac{\tilde{q}_0}{\tilde{\alpha}}.\quad (6.7)$$

¹Das Subscript steht für „weak corrugation“. Ebenso gebräuchlich ist die Bezeichnung „washboard potential“.

²Wir versehen im folgenden alle Parameter des Cosinuspotentials mit einer Tilde.

Dem entspricht mit der Wahl $\tilde{\eta} = \eta$

$$\tilde{\alpha} = \alpha^{-1} . \quad (6.8)$$

Desweiteren identifizieren wir

$$\frac{V}{\hbar} = \Delta . \quad (6.9)$$

In (6.6) stehen an der Stelle von $g(t)$ und $C(t)$ die Größen $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$ aus (3.15), die wir hier noch einmal aufführen:

$$Q_1(t) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{\text{tb}}(\omega)}{\omega^2} \sin(\omega t) ; \quad (6.10)$$

$$Q_2(t) = \frac{q_0^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{\text{tb}}(\omega)}{\omega^2} (1 - \cos(\omega t)) \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) . \quad (6.11)$$

Man erkennt nun direkt unter Vergleich mit (6.2) und (6.3), daß sie für eine spektrale Dichte

$$J_{\text{tb}}(\omega) = \frac{\eta\omega}{1 + \omega^2/\gamma^2} \quad (6.12)$$

mit $g(t)$ und $C(t)$ identisch sind. $J_{\text{tb}}(\omega)$ hat für kleine Frequenzen dasselbe Verhalten wie $J_{\text{wc}}(\omega)$ und ist daher eine ohmsche spektrale Dichte, die mit einem Drude-Cutoff versehen ist. Setzt man die spektrale Dichte $J_{\text{tb}}(\omega)$ und die Parameterabbildungen (6.7), (6.8) und (6.9) in den Tight-Binding-Ausdruck (6.6) ein, so ist er bis aufs Vorzeichen mit dem zweiten Term in (6.5) identisch. Damit erhält man die Dualitätstransformation

$$\langle \hat{q}(t) \rangle_{\text{wc}} = \frac{F}{\eta} t - \langle \hat{q}(t) \rangle_{\text{tb}} \quad (t \rightarrow \infty) . \quad (6.13)$$

Die Mobilität ist über

$$\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \hat{q}(t) \rangle}{tF} \quad (6.14)$$

definiert. Mit der klassischen Mobilität $\mu_0 = 1/\eta$ des freien Brownschen Teilchens liefert dies die übliche Form der Dualitätstransformation

$$\mu_{\text{wc}} = \mu_0 - \mu_{\text{tb}} . \quad (6.15)$$

Diese Beziehung gilt für beliebige Kräfte und Temperaturen und ist somit überaus allgemein. Es besteht somit ein Zusammenhang zwischen der Dynamik in einem Cosinuspotential bei strikt ohmscher Dissipation (6.1) und der Dynamik im Tight-Binding-Gitter mit der spektralen Dichte (6.12). Dabei sind die Gitterkonstanten beider Modelle durch (6.7) verknüpft. Der Zusammenhang (6.8) zwischen den Dämpfungsparametern bedeutet, daß die Regime mit schwacher Dämpfung ($\alpha < 1$) und starker Dämpfung ($\alpha > 1$) ausgetauscht werden. Wir werden sehen, daß sich dies auch bei der Verallgemeinerung auf nichtohmsche spektrale Dichten so verhalten wird.

Unter Zuhilfenahme der Dualitätstransformation erkennt man durch Anwendung der Ergebnisse im Tight–Binding–Gitter, daß es für $T = 0$ auch im Cosinuspotential einen Delokalisierungs–Lokalisierungs–Übergang bei $\alpha = 1$ gibt³. Für $\alpha > 1$ und kleine Kräfte ist $\mu_{\text{tb}}^{(l)} = 0$, für $\alpha < 1$ dagegen haben wir $\mu_{\text{tb}}^{(l)} = \mu_0$. Dies überträgt sich mit (6.15) unter Beachtung von (6.8) direkt auf die lineare Mobilität im Cosinuspotential:

$$\begin{aligned}\mu_{\text{wc}}^{(l)}(T = 0) &= \mu_0 && \text{für } \tilde{\alpha} < 1 ; \\ \mu_{\text{wc}}^{(l)}(T = 0) &= 0 && \text{für } \tilde{\alpha} > 1 .\end{aligned}\tag{6.16}$$

Für sehr große Kräfte nähert sich die Mobilität im Cosinuspotential der des Brownschen Teilchens. Die Mobilität im Tight–Binding–Gitter verschwindet also. Ähnlich verhält sich ein Zweizustandssystem, bei dem die Tunnelrate bei großer Asymmetrie verschwindet, wobei die Form der spektralen Dichte des Bades eine Rolle spielt [92]. Dies entspricht den Erwartungen. Wie schon in der Störungstheorie mit und ohne Entartung deutlich wird, sind Tunnelprozesse bei resonanten Energieleveln begünstigt, da dann die Zustände bereits in nullter Ordnung mischen, während bei verstimmtten Leveln dies erst in erster Ordnung auftritt. Bei der Anwesenheit eines Bades führt die Kopplung zu einer effektiven Aufspaltung der Energieniveaus, so daß für kleinen Bias in der Regel resonante Energieniveaus in beiden Mulden existieren, während für große Asymmetrie erneut die Rate sehr klein wird. Berücksichtigt man wie im Tight–Binding–Modell nur die Grundzustände in jedem Topf, gehen also die Tunnelraten und damit die Mobilität des Teilchens gegen 0. Bei der Betrachtung realer Systeme bricht der Tight–Binding–Limes allerdings für zu große Kräfte zusammen.

Zur Illustration der effektiven Aufspaltung durch das Bad schweifen wir kurz ab. Die Tunnelrate ist nach der vorhergehenden Betrachtung auch durch den Überlapp des Badzustandes beeinflusst. Daher kommt man in der Regel nicht um die volle Behandlung des Problems herum. Bei manchen Problemen kann man die Näherung durchführen, daß das Bad nur sehr träge dem Teilchen folgt. Sie liegt der Marcustheorie zugrunde [93]. Dann wird das Bad durch eine kollektive Koordinate q beschrieben, in der sich der Einfluß des Bades auf die effektiven Niveaus durch Parabeln ausdrücken läßt. An ihrem Schnittpunkt hat das Gesamtsystem die gleiche Energie bei in etwa identischer Badkonfiguration. Abbildung (6.1) zeigt die Situation für zwei Töpfe.

Nun wenden wir uns dem zweiten Moment zu. Der cot–Term in (5.34) liefert für strikt ohmsche spektrale Dichten und $t \rightarrow \infty$ gerade das zweite Moment im Tight–Binding–Gitter. Für große Zeiten können wir zudem die Entwicklung⁴

$$\sum_{l=1}^{2m} \mu_l C(t - t_l) \approx \sum_{l=1}^{2m} \mu_l C(t) - \sum_{l=1}^{2m} \mu_l t_l \dot{C}(t)\tag{6.17}$$

³Tatsächlich ist die historische Reihenfolge der Erlangung dieser Ergebnisse genau umgekehrt.

⁴Diese Näherung hat nur für ohmsche Dissipation einen hinreichend großen Gültigkeitsbereich, wie aus (2.105) ersichtlich ist.

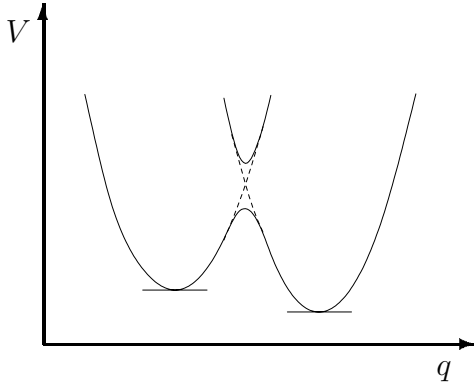


Abbildung 6.1: Darstellung der Modifizierung der Energieniveaus durch das Bad über eine kollektive Badkoordinate q in der Marcus-Theorie, die auf einem Franck-Condon-Prinzip beruht.

vornehmen. Wegen der Randbedingungen für die Kombinatorik verschwindet der erste Term. Nach dem FDT ergibt $\dot{C}(t)$ im Langzeitlimit gerade $g(t)/\beta$. Ebenfalls unter der Benutzung des FDT erkennt man, daß der Term $\sum_{l=1}^{2m} \langle x_{\xi}^2(t_l) \rangle$ genau den gleichen Beitrag liefert. Zusammengenommen ergeben sie

$$-4 \lim_{F \rightarrow 0} \frac{\langle \hat{q}(t) \rangle_{\text{tb}}}{F\beta} .$$

Es ist also

$$\langle \hat{q}^2(t) \rangle_{\text{wc}} = \langle \hat{q}^2(t) \rangle_0 + \langle \hat{q}^2(t) \rangle_{\text{tb}} - \frac{4}{F\beta} \langle \hat{q}(t) \rangle_{\text{tb}} \quad (t \rightarrow \infty) . \quad (6.18)$$

Wie schon beim ersten Moment läßt sich dies auch in Mobilitäten und Diffusionskonstanten ausdrücken:

$$D_{\text{wc}} = D_0 + D_{\text{tb}} - \frac{2}{\beta} \mu_{\text{tb}} . \quad (6.19)$$

Unter Benutzung der Einsteinrelation

$$\beta D = \mu_l , \quad (6.20)$$

die sowohl im Tight-Binding-Gitter als auch für das freie Brownsche Teilchen gültig ist, erkennt man, daß sich diese Beziehung auch auf das Cosinuspotential überträgt.

6.2 Nichtohmsche spektrale Dichten

Vergleicht man die allgemeinen Ausdrücke für $g(t)$ und $C(t)$ sowie für $Q_1(t)$ und $Q_2(t)$, so erkennt man, daß sie sich auch für nichtohmsche Dissipation zueinander

in Beziehung bringen lassen, wenn $s < 2$ gilt. Wir setzen die entsprechenden Ausdrücke gleich und erhalten

$$\hbar \tilde{k}_0^2 J_{\text{wc}}(\omega) |g(\omega)|^2 = \frac{q_0^2 J_{\text{tb}}(\omega)}{\hbar \omega^2} . \quad (6.21)$$

Als erstes wollen wir das Verhalten der somit bestimmten spektralen Dichte $J_{\text{tb}}(\omega)$ für kleine Frequenzen bestimmen. Für

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \eta_{\tilde{s}} \omega^{\tilde{s}} \quad (6.22)$$

gilt⁵[94]

$$g(\omega) = \frac{\sin(\tilde{s}\pi/2)}{\tilde{\eta}_{\tilde{s}} \exp(-i\pi\tilde{s}/2)} \omega^{-\tilde{s}} \quad (\omega \rightarrow 0) . \quad (6.23)$$

Daraus erhält man sofort

$$J_{\text{tb}}(\omega) \sim \omega^{2-\tilde{s}} \quad (\omega \rightarrow 0) \quad (6.24)$$

und damit

$$s = 2 - \tilde{s} \quad (\tilde{s} < 2) . \quad (6.25)$$

Subohmsche spektrale Dichten werden also auf superohmsche, superohmsche dagegen auf subohmsche spektrale Dichten abgebildet. Der Fall ohmscher spektraler Dichten ist hierin als Sonderfall enthalten.

Abbildung (6.2) verdeutlicht das Niederfrequenzverhalten der spektralen Dichte

$$J_{\text{tb}}(\omega) = \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \frac{\omega^{2-\tilde{s}}}{(m\omega^{2-\tilde{s}} - \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \cot(\tilde{s}\pi/2))^2 + \tilde{\eta}_{\tilde{s}}^2} \quad (6.26)$$

des Tight-Binding-Modells in natürlichen Einheiten ($\eta_s = 1$, bei geeigneter Wahl der Gitterkonstanten, $m = 1$) für verschiedene vorgegebene strikt algebraische spektrale Dichten $J_{\text{wc}}(\omega) = \tilde{\eta}_{\tilde{s}}$ im Cosinuspotential.

Über das Hochfrequenzverhalten der transformierten spektralen Dichte lassen sich keine allgemeinen Aussagen machen. Der kinetische Term im Nenner der Greenschen Funktion sorgt jedoch immer für ein hinreichend starkes Abklingen. Für strikt algebraische spektrale Dichten $J_{\text{wc}}(\omega) = \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \omega^{\tilde{s}}$ erhält man ein Abklingen mit

$$J_{\text{tb}}(\omega) \sim \omega^{\tilde{s}-2} . \quad (6.27)$$

Abbildung (6.3) gibt einen Einblick in das Verhalten für größere Frequenzen. Die Tight-Binding-Dichten erhalten also ein Maximum und klingen ab, beides Eigenschaften, die man auch bei physikalischen Systemen erwarten darf.

⁵Der Exponentialterm im Nenner sichert (bei geeigneter Wahl des Verzweigungsschnittes) $g(-\omega) = g^*(\omega)$ und sorgt somit dafür, daß $g(t)$ reell ist.

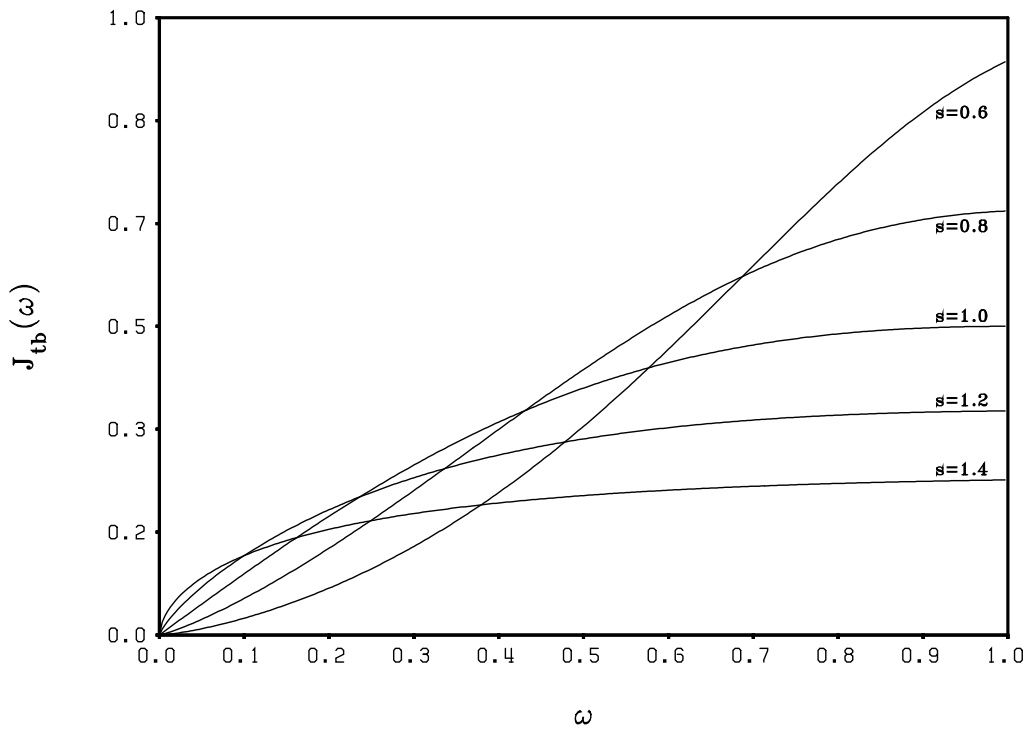


Abbildung 6.2: Niederfrequenzverhalten der spektralen Dichte $J_{tb}(\omega)$ nach (6.26) für strikt algebraische Dichten $J_{wc}(\omega) \sim \omega^s$ in natürlichen Einheiten.

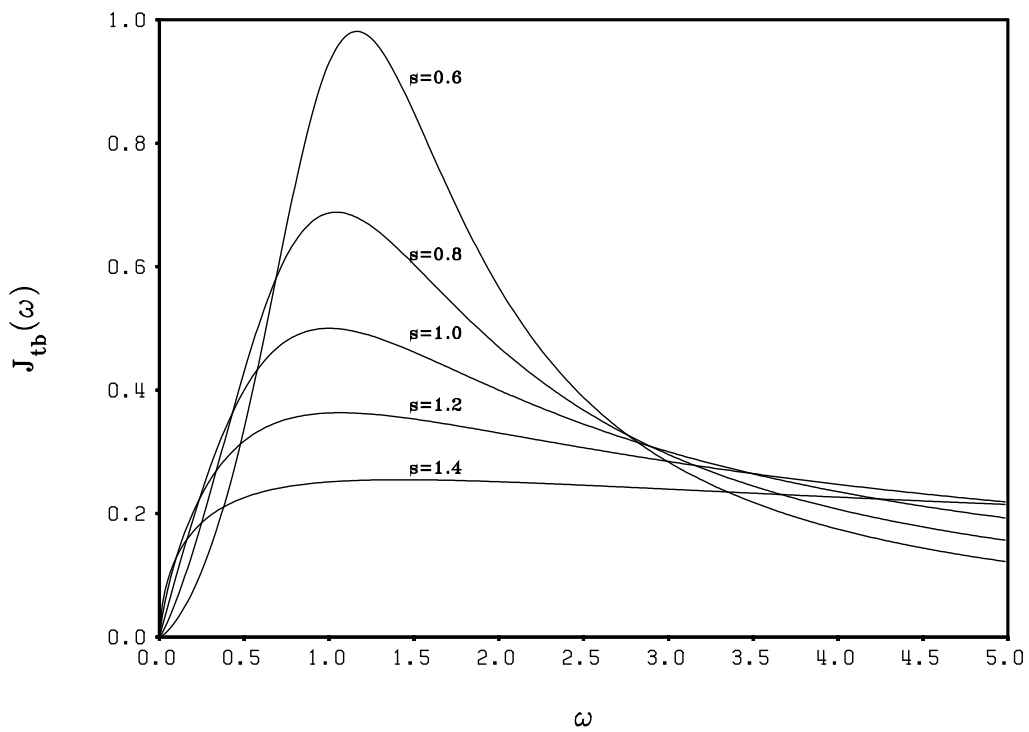


Abbildung 6.3: Mittel- und Hochfrequenzverhalten der spektralen Dichte $J_{tb}(\omega)$ für strikt algebraische Dichten $J_{wc}(\omega) \sim \omega^s$ gemäß (6.26). Wieder sind natürliche Einheiten gewählt worden.

Die Beziehung (6.21) läßt sich auch umkehren, indem man $\hbar\tilde{k}_0^2 g(\omega)$ durch $Q_1(\omega)$ bzw. zur richtigen Behandlung der Pole unter Berücksichtigung der Kausalität $\hbar\tilde{k}_0^2 g(\omega+i0^+)$ durch $-q_0^2 \tilde{K}(\omega)/(\hbar\omega^2)$ aus (2.16) ersetzt, welches von $J_{\text{tb}}(\omega)$ abhängt. Es ergibt sich

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2 \omega^2 J_{\text{tb}}(\omega)}{q_0^2 |\tilde{K}(\omega)|^2} = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2 J_{\text{tb}}(\omega)}{q_0^2 |\eta(\omega)|^2}. \quad (6.28)$$

Dasselbe Ergebnis erhält man auch unter Nutzung der Kramers–Kronig–Relationen (2.46), indem man aus

$$g''(\omega) = J_{\text{wc}}(\omega) |g(\omega)|^2 \quad (6.29)$$

und (6.21) $g'(\omega)$ errechnet und wieder in (6.21) einsetzt. $\tilde{K}(\omega)$ ist mit dem Niederfrequenzverhalten der Greenschen Funktion $g_{\text{tb}}(\omega)$ des Teilchens im Tight–Binding–Gitter verbunden. Dort gilt

$$g_{\text{tb}}(\omega) = -\frac{1}{\tilde{K}(\omega)} \quad (\omega \rightarrow 0). \quad (6.30)$$

Daher läßt sich auch

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{q_0^2} \omega^2 J_{\text{tb}}(\omega) |g_{\text{tb}}(\omega)|^2 \quad (\omega \rightarrow 0) \quad (6.31)$$

schreiben. Diese Beziehung gilt für $m = 0$ im Tight–Binding–Gitter über den gesamten Frequenzbereich. Der Zusammenhang zwischen $J_{\text{wc}}(\omega)$ und $J_{\text{tb}}(\omega)$ ist demnach im Niederfrequenzbereich völlig symmetrisch. Im Hochfrequenzbereich zeigt $J_{\text{wc}}(\omega)$ ein schwächeres Abklingverhalten als umgekehrt $J_{\text{tb}}(\omega)$, da der kinetische Term fehlt.

Um die Forderung $m = 0$ im Tight–Binding–Gitter etwas weiter zu diskutieren, wollen wir einen weiteren Weg beschreiten, um (6.21) zu invertieren. Dazu schreiben wir

$$g_{\text{tb}}''(\omega) = |g_{\text{tb}}(\omega)|^2 J_{\text{tb}}(\omega) = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{q_0^2} |g_{\text{tb}}(\omega)|^2 \omega^2 g_{\text{wc}}''(\omega). \quad (6.32)$$

Diese Form von (6.21) ist dabei als Integralgleichung für $J_{\text{wc}}(\omega)$ anzusehen, die diese Größe als Funktional in Abhängigkeit von $J_{\text{tb}}(\omega)$ liefert. Wir lösen sie selbstkonsistent mit dem Ansatz

$$g_{\text{wc}}''(\omega) = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{q_0^2} |g_{\text{wc}}(\omega)|^2 \omega^2 g_{\text{tb}}''(\omega). \quad (6.33)$$

Ineinander eingesetzt liefert dies den völlig symmetrischen Ausdruck

$$|g_{\text{wc}}(\omega)| = \frac{q_0^2}{\hbar^2 \tilde{k}_0^2 \omega^2 |g_{\text{tb}}(\omega)|}. \quad (6.34)$$

Damit erhält man als Lösung von (6.21) die Beziehung

$$\hbar k_0^2 J_{\text{tb}}(\omega) |g_{\text{tb}}(\omega)|^2 = \frac{\tilde{q}_0^2 J_{\text{wc}}(\omega)}{\hbar \omega^2}. \quad (6.35)$$

Da auch diese völlig symmetrisch ist, ist der gewählte Ansatz daher tatsächlich richtig, das Vorgehen war also selbstkonsistent. Die totale Symmetrie im Bad erscheint sehr befriedigend und deutet darauf hin, daß die Ursache für die Dualitätstransformation sehr tief liegt und nicht rein formaler Natur ist. In (6.35) haben wir allerdings noch nicht betrachtet, daß auch die Masse des Teilchens mittransformiert werden muß. Startet man etwa mit einer spektralen Dichte $J_{\text{wc}}(\omega)$ im Cosinuspotential, so erhält man ein $J_{\text{tb}}(\omega)$, das von \tilde{m} abhängig ist. Invertiert man nun die Beziehung mit Hilfe von (6.35), so ist die zurücktransformierte Dichte $J'_{\text{wc}}(\omega)$ von der Masse m des Teilchens im Tight-Binding-Gitter abhängig. Nun ist jedoch $J(\omega) = J'(\omega)$ zu fordern. Dies dient zur Bestimmung der Beziehung $m(\tilde{m})$. In Formeln ausgedrückt führen diese Überlegungen auf

$$\begin{aligned} J_{\text{wc}}(\omega) &= \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \omega^{\tilde{s}} f(\omega/\omega_c) \\ J_{\text{tb}}(\omega) &= \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{\tilde{m}^2 \tilde{q}_0^2} \omega^{\tilde{s}-2} f(\omega/\omega_c) \quad (\omega \rightarrow \infty) \\ J'_{\text{wc}}(\omega) &= \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \frac{\hbar^4 \tilde{k}_0^4}{\tilde{m}^2 \tilde{q}_0^4} \omega^{\tilde{s}} |g_{\text{tb}}(\omega)|^2 f(\omega/\omega_c) \quad (\omega \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (6.36)$$

und somit

$$|g_{\text{tb}}(\omega)| = \frac{\tilde{m} \tilde{q}_0^2}{\hbar^2 \tilde{k}_0^2} = \text{const.} \quad (\omega \rightarrow \infty). \quad (6.37)$$

Dies kann nur für $m = 0$ erfüllt werden, sofern $J_{\text{tb}}(\omega)$ keinen Massenrenormierungsterm enthält. Um zu sehen, ob ein solcher Term auftritt, betrachten wir die in (2.16) gegebene Größe $\tilde{K}(\omega)$, die im Nenner der Greenschen Funktion $g_{\text{tb}}(\omega)$ auftritt, ein wenig genauer. Sie erhält für die transformierte spektrale Dichte die Form

$$\tilde{K}(\omega) = \tilde{\eta}_{\tilde{s}} \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{\tilde{q}_0^2} \frac{2\omega^2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega'^{\tilde{s}+2} f(\omega'/\omega_c) |g(\omega')|^2}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)}. \quad (6.38)$$

Wenn ω sehr groß wird, sorgt $f(\omega/\omega_c)$ dafür, daß der Pol im Nenner des Integranden von der Integrationsvariablen nicht mehr erreicht wird. Wir können dann $(\omega'^2 - \omega^2)$ im Nenner durch $-\omega^2$ ersetzen. Lassen wir das Integral bis zu einer oberen Integrationsgrenze von ω_{max} in der Größenordnung von ω_c laufen, so erhalten wir die Näherung

$$\tilde{K}(\omega) \approx -\frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_{\text{max}}} d\omega' \frac{J_{\text{tb}}(\omega')}{\omega'} \approx -\eta_{\text{tb}}(t=0) \quad (\omega \rightarrow \infty). \quad (6.39)$$

Also erhalten wir für große Frequenzen tatsächlich einen konstanten Beitrag, jedoch keinen Massenrenormierungsterm. Damit ist auch die Masse m festgelegt. Sie muß wegen der Forderung (6.37) verschwinden. Damit haben wir also

$m(\tilde{m}) = 0$. Außerdem erhalten wir

$$\tilde{m} = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_0^2}{q_0^2 \eta_{\text{tb}}(t=0)}. \quad (6.40)$$

Es sei noch angemerkt, daß die Masse des Teilchens im Tight-Binding-Gitter nur durch das Tunnelmatrixelement Δ in die Ausdrücke für die Dynamik eingeht. Man kann sich auf den Standpunkt stellen, daß Δ vorgegeben ist, so daß der Masse also keine wesentliche Bedeutung zukommt. Gleiches gilt auch für die Greensche Funktion $g_{\text{tb}}(\omega)$. Sie ist einem freien Brownschen Teilchen zugeordnet, in ihr tritt also kein Selbstenergieterm auf. Die Forderung einer verschwindenden Masse m ist demnach rein formaler Natur.

Setzt man $g(\omega)$ und $J_{\text{wc}}(\omega)$ mitsamt ihrer Vorfaktoren in (6.21) ein, so erhält man für die nunmehr dimensionsbehafteten Dämpfungsparameter⁶

$$\alpha_s = \frac{\eta_s q_0^2}{2\pi \hbar \sin(s\pi/2)} \quad (6.41)$$

die Beziehung

$$\alpha_s \alpha_{\tilde{s}} = 1. \quad (6.42)$$

Sie reduziert sich im ohmschen Fall auf den schon angeführten Zusammenhang (6.8) zwischen den Kondoparametern. Allerdings kommt ihr im nichtohmschen Fall nicht dieselbe Bedeutung zu, da die Abbildung schwacher und starker Dämpfung schon durch die Beziehung zwischen s und \tilde{s} ausgedrückt wird.

Schließlich läßt sich die Reskalierung der Gitterkonstante mit dem Niederfrequenzverhalten in Zusammenhang bringen. Wir definieren in Analogie zu (6.4)

$$\alpha = \frac{\eta q_0^2}{2\pi \hbar} = \frac{2\pi \eta}{\hbar k_0^2} \quad (6.43)$$

wobei nun η durch

$$\eta = \frac{\hbar \tilde{k}_0}{q_0} \quad (6.44)$$

definiert ist. Dann gilt per Definition

$$\alpha \tilde{\alpha} = 1 \quad (6.45)$$

und über die Transformationsgleichung der spektralen Dichte

$$\eta^2 = \lim_{\omega \rightarrow 0} \eta_{\text{wc}}(\omega) \eta_{\text{tb}}(\omega) = \frac{\tilde{\eta}_{\tilde{s}} \eta_s}{\sin^2(s\pi/2)}. \quad (6.46)$$

⁶Durch Multiplikation mit einer geeigneten Konstanten ω_0^{s-1} ist es auch möglich, eine dimensionslose Größe zu konstruieren.

Die transformierte Masse nimmt dann nach (6.40) die Form

$$\tilde{m} = \frac{\eta^2}{\eta_{\text{tb}}(t=0)} \quad (6.47)$$

an.

Für $\tilde{s} > 2$ erhält man rein formal die Beziehung

$$s = \tilde{s} - 2, \quad (6.48)$$

die im Gegensatz zu (6.25) nicht mehr symmetrisch ist. Es scheinen also einer spektralen Dichte im Tight-Binding-Gitter zwei verschiedene spektrale Dichten im Cosinuspotential zugeordnet zu sein. Allerdings verliert in diesem Bereich das optische Theorem (2.67) seine Gültigkeit. Es läßt sich also keine direkte Selbstdualität im Cosinuspotential herleiten, mit der sich auf einfache Art und Weise das bekannte Verhalten für $\tilde{s} \geq 2$ mit dem Bereich $\tilde{s} < 2$ verknüpfen ließe.

Kapitel 7

Nichtohmsche Dynamik im Cosinuspotential

Die in Kapitel 5 erhaltenen Ausdrücken für das erzeugende Funktional und die ersten beiden Momente wollen wir nun zum Ausgangspunkt für Rechnungen im subohmschen und im superohmschen Regime machen.

7.1 Das erzeugende Funktional im subohmschen Regime

Wir betrachten das erzeugende Funktional (5.27) für subohmsche spektrale Dichten. In Differenzzeiten geschrieben lautet es

$$\begin{aligned}
 Z^{(\text{wc})}(\kappa, \lambda) &= Z_0(\kappa, \lambda) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp(-\lambda\tau_{0,2m}) \sum_{\{\mu_i\}} \right. & (7.1) \\
 &\times \prod_{i=1}^{2m} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) + \frac{\hbar \kappa k_0}{2} g(\tau_{i,2m}) \right) \\
 &\times \exp \left\{ ik_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j F \int_0^{\tau_{0,j-1}} d\tau g(\tau) + k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(\tau_{i,j-1}) \right\} \\
 &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \kappa k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j \langle x_{\xi}^2(\tau_{0,j-1}) \rangle + \kappa k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j C(\tau_{j,2m}) \right\} \left. \right].
 \end{aligned}$$

Für die Integrationen über τ_0 und über τ_{2m} stehen keine konvergenzerzeugenden Faktoren zur Verfügung. Die Konvergenz der Integrationen über die Differenzzeiten τ_1 bis τ_{2m-1} folgt aus den Betrachtungen zur Konvergenz im superohmschen Tight-Binding-Regime. Für subohmsche spektrale Dichten verschwinden $g(t)$

und $\dot{C}(t)$ nach (2.104) und (2.105) für große Zeiten wie t^{s-1} . Der Term $B_m(\kappa)$ aus (5.29) beeinflusst im Fall $g_{j,2m} \neq 0$ für $|\kappa| < |k_0 g_{j,2m}/2|$ die durch $H_m(\kappa)$ (5.31) vermittelte Konvergenz nicht. Für $g_{j,2m} = 0$ liefert er wie auch $H_m(\kappa)$ asymptotisch eine Konstante. Dann muß $A_m(\kappa)$ (5.25) für jede Ordnung in κ auf seine Konvergenzeigenschaften untersucht werden. Da $g(\tau)$ asymptotisch verschwindet, skaliert der Ausdruck jedoch für große τ_{2m} den Parameter κ gegen 0.

Damit ergibt sich

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(\kappa) \rightarrow A(0) = 0 \quad \text{für } \tau_{2m} \rightarrow \infty. \quad (7.2)$$

Nur für kleine Differenzzeit τ_{2m} macht sich die κ -Abhängigkeit des Integranden bemerkbar. Dies führt dazu, daß der gesamte kombinatorische Ausdruck um eine Ordnung in λ schwächer divergiert, als das durch die formale Divergenz der Integration von der Integration über τ_{2m} vorgegeben ist. Somit sollte er aufgrund dieser qualitativen Analyse im Zeitregime von niedriger Ordnung als 1 sein. Dies bestätigt sich bei der Berechnung der ersten beiden Momente [41], deren Beitrag allein durch das erzeugende Funktional $Z_0(\kappa, t)$ des freien Brownschen Teilchens gegeben ist. Dies entspricht genau dem Verhalten des Teilchens im Tight-Binding-Gitter.

7.2 Einsteinrelation für $s \leq 1$

Die Einsteinrelation (2.85) ist für das freie Brownsche Teilchen gültig. Sie liefert für das linearisierte erste Moment (5.35) im Cosinuspotential

$$\begin{aligned} \frac{2 \langle \hat{q}(\lambda) \rangle_l}{\beta F} &= \langle x_\xi^2(\lambda) \rangle + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \sum_{\{\mu_i\}} \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda \tau_{0,2m}\} \\ &\times \left. \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \frac{1}{2} k_0 \sum_{l=1}^{2m} \mu_l \langle x_\xi^2(\tau_{0,l-1}) \rangle \right] \\ &\times \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Diese Ausdrücke tauchen auch im zweiten Moment (5.36) auf. Mit den Definitionen

$$\begin{aligned} I_1 &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda \tau_{0,2m}\} \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \\ &\times \sum_{k=1}^{2m-1} \hbar k_0 g(\tau_{k,2m}) \cos \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>k} \mu_j g(\tau_{k,j-1}) \right) \\ &\times \prod_{k \neq i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \end{aligned} \quad (7.4)$$

und

$$\begin{aligned}
I_2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) k_0 \sum_{k=1}^{2m} \mu_k C(\tau_{k,2m}) \\
&\times \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \quad (7.5)
\end{aligned}$$

ist die Einsteinrelation (2.85) im Cosinuspotential somit genau dann gültig, wenn

$$I_1 + I_2 = 0 \quad (7.6)$$

ergibt. Zunächst diskutieren wir diese Ausdrücke, indem wir nur die Integration über τ_{2m} betrachten. Für den in diesem Abschnitt betrachteten Parameterbereich ist diese Zeit zusammen mit τ_0 die einzige, die nicht an der oberen Integrationsgrenze unterdrückt wird. Entwicklung um τ_{2m} ergibt

$$\begin{aligned}
I_1 &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \\
&\times \sum_{k=1}^{2m-1} \hbar k_0 g(\tau_{2m}) \cos \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>k} \mu_j g(\tau_{k,j-1}) \right) \\
&\times \prod_{k \neq i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \quad (7.7) \\
&= \int_0^{\infty} d\tau_0 \int_0^{\infty} d\tau_{2m} \exp\{-\lambda(\tau_0 + \tau_{2m})\} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \hbar k_0 g(\tau_{2m}) \\
&\times n_2(\lambda)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
I_2 &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \sum_{\{\mu_i\}} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) k_0 \left(- \sum_{k=1}^{2m} g_{k,2m} \tau_k \right) \\
&\times \dot{C}(\tau_{2m}) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \quad (7.8) \\
&= - \int_0^{\infty} d\tau_0 \int_0^{\infty} d\tau_{2m} \exp\{-\lambda(\tau_0 + \tau_{2m})\} \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) k_0 \dot{C}(\tau_{2m}) \\
&\times n_1(\lambda) .
\end{aligned}$$

$n_1(\lambda)$ und $n_2(\lambda)$ sind in (3.63) und (3.69) angegeben. Diese Ausdrücke stimmen somit bis auf die Integrationen über τ_0 und τ_{2m} genau mit denen des zweiten bzw. ersten Momentes im Tight-Binding-Gitter überein. Die Gültigkeit der Einsteinrelation dort sorgt somit dafür, daß sich beide Ausdrücke tatsächlich wegheben. Dieses Ergebnis stimmt mit dem von Chen [40] überein.

Im superohmschen Parameterbereich ist eine Entwicklung nur um τ_{2m} nicht gerechtfertigt, da auch die Interclusterdifferenzzeiten groß werden. Mit ihm werden wir uns später beschäftigen.

7.3 Dynamik im superohmschen Regime

Der Bereich $1 < s < 2$ entspricht nach der verallgemeinerten Dualitätstransformation dem subohmschen Bereich im Tight-Binding-Gitter. Insbesondere bedeutet dies, daß wir wieder für Trajektorien, die im Ladungsbild in mehrere neutrale Cluster zerfallen, divergente Differenzzeitintegrale erhalten. Wir übertragen nun die beim Tight-Binding-Potential benutzte Technik der Faktorisierung auf die Ausdrücke im Cosinuspotential. Das erste Moment hat nach Einführung von Differenzzeiten und Laplacetransformation die Gestalt

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \\
 &+ \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \sum_{\{\mu_i\}} \exp\{-\lambda\tau_{0,2m}\} \\
 &\times \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \\
 &\times \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j} \mu_i \mu_j C(\tau_{i,j-1}) \right\} \sin \left(k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j F \int_0^{\tau_{0,j-1}} ds g(s) \right).
 \end{aligned} \tag{7.9}$$

Die Integration über τ_{2m} kann direkt durchgeführt werden und liefert $g(\lambda)$. Da die Integration über τ_0 nicht mit einem konvergenzerzeugenden Term behaftet ist, bereitet sie eine Divergenz. Es tragen also vor allem Terme mit großem τ_0 bei, so daß wir um diese Zeit herum entwickeln können. Dies betrifft alleine den Bias-Term $G_m^{(\text{wc})}$ (5.30). Für das Argument des Sinus erhält man

$$k_0 \sum_{j=1}^{2m} \mu_j F \int_0^{\tau_{0,j-1}} ds g(s) = k_0 F g(\tau_0) \sum_{j=1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j. \tag{7.10}$$

Dabei wurde wie schon bei der Behandlung des ersten Momentes im Tight-Binding-Modell die Tatsache berücksichtigt, daß Terme, in denen neben τ_0 Interclusterdifferenzzeiten τ_{k_i} auftreten, die ebenfalls sehr groß werden können, nach Durchführung der Kombinatorik über partiell gespiegelte Wege verschwinden. Daher schreiben wir auch hier zur Vereinfachung nur τ_0 in das Argument.

Das Integral der qualitativen Form

$$\int_0^{\infty} d\tau_0 \sin(cF\tau_0^{s-1}) \exp(-\lambda\tau_0) \tag{7.11}$$

ist für $\lambda \rightarrow 0$ nicht wohldefiniert. Insbesondere erkennt man durch Reskalierung, daß sich die Grenzübergänge $F \rightarrow 0$ und $\lambda \rightarrow 0$ bzw. $t \rightarrow \infty$ nicht vertragen. Geht man von einem realen Experiment aus, so wird man die lineare Mobilität etwa dadurch bestimmen, welche Zeit das Teilchen braucht, bis es eine bestimmte Distanz zurückgelegt ist. Diese Distanz ist nach oben durch die Größe der Probe

sowie nach unten durch die Ortsauflösung bestimmt. Man mißt für verschiedene kleine Kräfte und extrapoliert das Ergebnis für $F \rightarrow 0$. In Vorgriff auf unser Resultat, daß das erste Moment linear in der Zeit geht, wird sich dabei die Meßzeit wie $1/F$ verhalten¹. Man kann auch argumentieren, daß sich die Kraft beliebig klein machen läßt, während die Zeiten in der Regel endlich bleiben. Dies bedeutet, daß Ft^{s-1} im von uns betrachteten Regime gegen Null geht. Die physikalisch sinnvolle Wahl der Reihenfolge der Grenzübergänge ist also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{F \rightarrow 0} .$$

Untersucht man nun den Term

$$\int_0^\infty d\tau_0 \int_0^\infty d\tau_1 \cdots \int_0^\infty d\tau_{2m} \delta\left(\sum_{i=1}^{2m} \tau_i - t\right) \times G_m^{(\text{wc})} H_m^{(\text{wc})} a_m^{(\text{wc})} \quad (7.12)$$

aus dem Ausdruck (5.33) für das erste Moment, in dem man Differenzzeiten eingeführt hat, jedoch noch nicht zur Laplacetransformierten übergegangen ist, so erkennt man mit dem obigen Argument, daß man im gesamten Integrationsbereich den Sinus in $G_m^{(\text{wc})}$ (5.30) durch sein Argument nähern kann. Diese Näherung ist daher auch nach dem Übergang zur Laplacetransformierten gültig. Damit läßt sich die Integration über τ_0 durchführen. Für das erste Moment bekommt man so

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^\infty \hat{\mathcal{D}}_{0,2m}[\tau] \sum_{\{\mu_i\}} \exp\{-\lambda\tau_0, 2m\} \\ &\times \frac{\hbar k_0}{2} g(\lambda) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin\left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_i + \cdots + \tau_{j-1})\right) \\ &\times \exp\left\{\frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(\tau_i + \cdots + \tau_{j-1})\right\} k_0 F g(\lambda) \sum_{j=1}^{2m-1} g_{j,2m} \tau_j . \end{aligned} \quad (7.13)$$

Vergleicht man nun diesen Ausdruck mit dem ersten Moment des Tight-Binding-Potentials (3.44), so erkennt man, daß die verbleibenden Integrationen genau wie dort in neutrale Cluster faktorisiert sind. Es ist also

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) - F \frac{\hbar k_0^2}{2} g^2(\lambda) \frac{n_1^{(k)}(\lambda)}{1 + \hbar k_0^2/2 \cdot n_1^{(k)}(\lambda) \lambda g(\lambda)} \\ &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \frac{1}{1 + \hbar k_0^2/2 \cdot n_1^{(k)}(\lambda) \lambda g(\lambda)} . \end{aligned} \quad (7.14)$$

¹Die selbe Argumentation läßt sich aber auch für den Fall führen, daß der Brownsche Term der dominante ist. Dann ist $\langle q \rangle(t) \sim Ft^s$, es verschwindet also erneut Ft^{s-1} .

Die dabei auftretende dimensionslose Größe $n_1^{(k)}(\lambda)$ ist dabei genau mit der im Tight–Binding–Modell aufgetretenen identisch. Sie geht aus (3.64) durch die Beschränkung der Kombinatorik auf einen neutralen Cluster hervor. Für $\lambda \rightarrow 0$ divergiert $\lambda g(\lambda)$, so daß sich in erster Ordnung gerade der Beitrag des freien Teilchens heraushebt. Bei der Betrachtung des Langzeitlimes ist also die Näherung

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle = F \frac{1}{\lambda^2} \frac{2}{\hbar k_0^2 n_1^{(k)}(\lambda)} \quad (7.15)$$

durchzuführen.

Dieses Ergebnis zeigt, daß das Teilchen auch im Cosinuspotential für den betrachteten Bereich spektraler Dichten eine konstante Driftgeschwindigkeit erhält. Ein noch so kleines Potential sorgt dafür, daß sich das Teilchen qualitativ anders verhält, als es in Abwesenheit des Potentials der Fall ist, wo $\langle \hat{q}(t) \rangle \sim t^s$ gilt. Diese Tatsache garantiert aber erst die Durchführbarkeit der Tight–Binding–Näherung im superohmschen Regime. Sie brähe für ein beschleunigtes Teilchen für große Zeiten zusammen, da dann die angesammelte kinetische Energie angeregte Zustände zugänglich machte.

Der Ausdruck $n_1^{(k)}(\lambda)$ ist mit der Bewegung eines Teilchens in einem Tight–Binding–Gitter verbunden. Dort ist die spektrale Dichte durch

$$\hbar \tilde{k}_0^2 \omega^2 J_{\text{wc}}(\omega) |g(\omega)|^2 = \frac{q_0^2}{\hbar} J_{\text{tb}}(\omega) \quad (7.16)$$

gegeben. Die Gitterkonstante kann beliebig gewählt werden; sie taucht bei der Berechnung von $n_1^{(k)}(\lambda)$ nicht mehr auf. $n_1^{(k)}(\lambda)$ stellt dann den Beitrag aller Wege dar, die nicht die Diagonale berühren.

Eliminiert man $g(\lambda)$ zugunsten der Tight–Binding–Größe

$$f_1(\lambda) = \frac{\hbar k_0^2}{2} \lambda g(\lambda) , \quad (7.17)$$

die hier anstelle von (3.66) auftritt, so erhält Gl. (7.14) die Form

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(\lambda) \rangle_{\text{wc}} &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \frac{1}{1 + n_1^{(k)}(\lambda) f_1(\lambda)} \\ &= \frac{2F}{\hbar k_0^2} \frac{1}{\lambda^2} \frac{f_1(\lambda)}{1 + n_1^{(k)}(\lambda) f_1(\lambda)} . \end{aligned} \quad (7.18)$$

Dagegen lautete das Ergebnis im Tight–Binding–Fall

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_{\text{tb}} = \frac{F q_0^2}{2\hbar} \frac{1}{\lambda^2} \frac{n_1^{(k)}(\lambda)}{1 + n_1^{(k)}(\lambda) f_1(\lambda)} . \quad (7.19)$$

Für $\lambda \rightarrow 0$ läßt sich $f_1(\lambda)$ mit der Greenschen Funktion $g_{\text{tb}}(\lambda)$ nach

$$g_{\text{tb}}(\lambda) = \frac{q_0^2}{2\hbar} \frac{1}{\lambda f_1(\lambda)} \quad (7.20)$$

verknüpfen². Damit erhält man die Beziehung

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_{\text{tb}} = F \frac{1}{\lambda} g_{\text{tb}}(\lambda) - F \frac{1}{\lambda} g_{\text{tb}}(\lambda) \frac{1}{1 + n_1^{(k)}(\lambda) f_1(\lambda)}. \quad (7.21)$$

Der Term des freien Teilchens ist hier abgespaltet worden. In dieser Form lassen sich Tight–Binding–Ergebnis und Cosinus–Ergebnis am besten miteinander vergleichen. Im Langzeitlimes ergibt der Term niedrigerer Ordnung des Tight–Binding–Falls unter Ersetzung der Greenschen Funktion $g_{\text{tb}}(\lambda)$ durch $g_{\text{wc}}(\lambda)$ in der Form (7.21) den Cosinus–Ausdruck.

Diese Beziehung läßt sich auch umkehren. Durch Abspaltung des führenden Terms des Cosinus–Ergebnisses erhält man

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_{\text{wc}} = F \frac{1}{\lambda} g_{\text{wc}}(\lambda) \left(1 - \frac{f_1(\lambda) n_1^{(k)}(\lambda)}{1 + f_1(\lambda) n_1^{(k)}(\lambda)} \right). \quad (7.22)$$

Dagegen kann man das Tight–Binding–Resultat auch als

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle_{\text{tb}} = F \frac{1}{\lambda} g_{\text{tb}}(\lambda) \frac{f_1(\lambda) n_1^{(k)}(\lambda)}{1 + f_1(\lambda) n_1^{(k)}(\lambda)} \quad (7.23)$$

schreiben. Wieder ist der Term niedrigerer Ordnung im einen Fall mit dem gesamten Ergebnis des anderen Falls durch eine Ersetzung der Greenschen Funktionen in einer geeigneten Schreibweise verknüpft.

Das Ergebnis (7.14) läßt sich in einer Art und Weise erhalten, die die Nichtvertauschbarkeit der Grenzübergänge $\lambda \rightarrow 0$ und $F \rightarrow 0$ stärker verdeutlicht. Führt man nur die Integration über τ_{2m} durch, behält die über τ_0 jedoch noch bei und entwickelt noch nicht den Biasterm, so erhält man

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}(\lambda) \rangle &= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \quad (7.24) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m-1}[\tau] \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ -\lambda \left(\sum_{i=1}^{2m-1} \tau_i \right) \right\} \\ &\frac{\hbar k_0}{2} g(\lambda) \prod_{i=1}^{2m-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_i + \dots + \tau_{j-1}) \right) \\ &\times \exp \left\{ \frac{k_0^2}{2} \sum_{i,j} \mu_i \mu_j C(\tau_i + \dots + \tau_{j-1}) \right\} \sin \left\{ k_0 F \sum_{i=1}^{2m} \xi_i G(\tau_{0,i-1}) \right\} \end{aligned}$$

²Mit (7.17) bedeutet dies $g_{\text{tb}}(\lambda) = q_0^2 (\hbar^2 k_0^2 \lambda^2 g_{\text{wc}}(\lambda))^{-1}$. Man vergleiche mit (6.34).

$$\begin{aligned}
&= F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \\
&\quad + \frac{\hbar k_0}{2} g(\lambda) \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m-1}[\tau] \sum_{\{\mu_i\}} \exp \left\{ -\lambda \left(\sum_{i=1}^{2m-1} \tau_i \right) \right\} \\
&\quad a_m H_m \sin \left\{ k_0 F \sum_{i=1}^{2m} \xi_i G(\tau_{0,i-1}) \right\}.
\end{aligned}$$

Nun spalten wir erneut alle Graphen hinter der Nullstellenzeit τ_{2k_s} ab. H_m sowie a_m faktorisieren dabei in der gewohnten Weise:

$$H_m = H_{k_s} \cdot H_{m-k_s}; \quad (7.25)$$

$$a_m = a_{k_s} \cdot a_{m-k_s} \cdot \frac{\hbar k_0^2}{2} g(t_{2k_s}) \sum_{i>2k_s} g_{i,2m} \tau_i. \quad (7.26)$$

Der Einfachheit benutzen wir

$$f_{m-k_s}(t_{2k_s}) = \frac{\hbar k_0^2}{2} g(t_{2k_s}) \sum_{i>2k_s} g_{i,2m} \tau_i. \quad (7.27)$$

Desweiteren lautet der Biasterm

$$\begin{aligned}
G_m &= \sin \left\{ k_0 F \left[g(\tau_0) \sum_{i=1}^{2k_s} g_{i,2k_s} \tau_i + g(\tau_0 + \tau_{2k_s}) \sum_{i=2k_s+1}^{2m} g_{i,2m} \tau_i \right] \right\} \\
&= \sin \left\{ k_0 F g(\tau_0) \sum_{i=1}^{2k_s} g_{i,2k_s} \tau_i \right\} \cos \left\{ k_0 F g(\tau_0 + \tau_{2k_s}) \sum_{i=2k_s+1}^{2m} g_{i,2m} \tau_i \right\} \\
&\quad + \cos \left\{ k_0 F g(\tau_0) \sum_{i=1}^{2k_s} g_{i,2k_s} \tau_i \right\} \sin \left\{ k_0 F g(\tau_0 + \tau_{2k_s}) \sum_{i=2k_s+1}^{2m} g_{i,2m} \tau_i \right\}.
\end{aligned} \quad (7.28)$$

Durch Addition eines partiell gespiegelten Weges erkennt man, daß in der letzten Zeile nur der erste Term einen Beitrag liefert³. Den ersten Term kürzen wir mit $G_{k_s}(\tau_0) \cdot I_{m-k_s}(\tau_0 + \tau_{2k_s})$ ab. Somit haben wir als Integranden der zeitgeordneten Integration nach der Faktorisierung

$$a_{k_s} H_{k_s} G_{k_s}(\tau_0) \cdot a_{m-k_s} H_{m-k_s} I_{m-k_s}(\tau_0 + \tau_{2k_s}) \cdot f_{m-k_s}(\tau_{2k_s}). \quad (7.29)$$

Die ersten Terme liefern nach Integration über τ_0 den zu berechnenden Term \tilde{n} , der sich vom Tight-Binding- n dadurch unterscheidet, daß die Integration über τ_0 noch nicht durchgeführt ist und die Kraft F nichtlinear betrachtet wird. Weiterhin gilt die Beziehung

$$\frac{dG_m(t)}{dt} = \frac{2F}{\hbar k_0} \cdot I_m(t) f_m(t). \quad (7.30)$$

³ a_{m-2k_s} , f_{m-k_s} sowie der zweite Term in (7.28) liefern jeweils ein Minuszeichen.

Unter der Annahme, daß die Faktoren $G_{k_s}(\tau_0)$ und $I_{m-k_s}(\tau_0 + \tau_{2k_s})f_{m-k_s}(\tau_{2k_s})$ im Argument voneinander entkoppelt werden können, liefern die zweiten Terme gerade $\lambda\tilde{n}_1(\lambda)$ mit

$$\tilde{n}_1(\lambda) = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar}\right)^{2m} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{0,2m-1}[\tau] \sum_{\{\mu_i\}} \exp\{-\lambda\tau_{1,2m-1}\} a_m H_m G_m . \quad (7.31)$$

Das hiermit definierte $\tilde{n}_1(\lambda)$ ist jedoch nicht für $\lambda \rightarrow 0$ konvergent, sondern steht nur in Analogie zum Tight-Binding- $n_1^{(k)}$. Insgesamt erhält man

$$\tilde{n}_1 = \tilde{n}_1^{(k)} - \tilde{n}_1 \frac{\lambda\hbar k_0}{2F} \tilde{n}_1^{(k)} \quad (7.32)$$

und somit

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle = F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) - \frac{\hbar k_0}{2} g(\lambda) \frac{\tilde{n}_1^{(k)}}{1 + \tilde{n}_1^{(k)} \lambda \hbar k_0 / (2F)} . \quad (7.33)$$

Da hier das Verhältnis λ/F auftritt, sind die Grenzübergänge $\lambda \rightarrow 0$ und $F \rightarrow 0$ tatsächlich nicht vertauschbar. Führt man zuerst $\lambda \rightarrow 0$ aus, so ist der Korrekturterm von F unabhängig (!) und von niedrigerer Ordnung als der Brownsche Term. Dagegen erhält man für $F \rightarrow 0$ das obige Ergebnis zurück:

$$\langle \hat{q}(\lambda) \rangle = F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) - F \frac{1}{\lambda} g(\lambda) \frac{1}{1 + 2F / (\tilde{n}_1^{(k)} \lambda \hbar k_0)} . \quad (7.34)$$

7.4 Einsteinrelation im superohmschen Regime

Im Falle superohmscher Dissipation haben wir bisher nur das erste Moment betrachtet. Nun wenden wir uns dem zweiten Moment zu und benutzen dabei die Größen (7.4) und (7.5). Ziel ist erneut die Einsteinrelation.

Im ohmschen und subohmschen Regime wurde die Entwicklung nur um τ_{2m} durchgeführt. Beachtet man, daß Interclusterdifferenzzeiten ebenfalls groß werden können, so muß man auch diese festhalten, wenn sie im Argument auftreten. Faktoriisiert man um die letzte Interclusterdifferenzzeit τ_{2k_s} und führt die Kombinatorik über partiell gespiegelte Wege aus, so erhält man

$$\begin{aligned} I_1 &= I_1^{(k)} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar}\right)^{2m} \\ &\times \sum_{\{\mu_{1,2k_s}\}} \int_0^{\infty} \hat{\mathcal{D}}_{1,2k_s-1}[\tau] \exp\{-\lambda\tau_{1,2k_s-1}\} \\ &\times \sum_{k=1}^{2k_s-1} \cos\left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>k} \mu_j g(\tau_{k,j-1})\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \prod_{k \neq i=1}^{2k_s-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j}^{2k_s} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \\
& \times \sum_{\{\mu_{2k_s+1,2m}\}} \int_0^\infty \hat{D}_{2k_s+1,2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda \tau_{2k_s+1,2m-1}\} \sum_{j=2k_s+1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j \\
& \times \prod_{i=1}^{2k_s-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{2k_s+1=i<j}^{2m} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \\
& \times \int_0^\infty d\tau_{2m} \int_0^\infty d\tau_{2k_s} \int_0^\infty d\tau_0 \exp\{-\lambda(\tau_0 + \tau_{2k_s} + \tau_{2m})\} \\
& \times \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \hbar k_0 g(\tau_{2k_s} + \tau_{2m}) \frac{\hbar k_0^2}{2} \dot{g}(\tau_{2k_s}) \tag{7.35}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
I_2 &= I_2^{(k)} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{iV}{\hbar} \right)^{2m} \\
& \times \sum_{\{\mu_{1,2k_s}\}} \int_0^\infty \hat{D}_{1,2k_s-1}[\tau] \exp\{-\lambda \tau_{1,2k_s-1}\} \left(- \sum_{j=1}^{2k_s} g_{j,2m} \tau_j \right) \\
& \times \prod_{i=1}^{2k_s-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{i<j}^{2k_s} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \\
& \times \sum_{\{\mu_{2k_s+1,2m}\}} \int_0^\infty \hat{D}_{2k_s+1,2m-1}[\tau] \exp\{-\lambda \tau_{2k_s+1,2m-1}\} \sum_{j=2k_s+1}^{2m} g_{j,2m} \tau_j \\
& \times \prod_{i=1}^{2k_s-1} \sin \left(\frac{\hbar k_0^2}{2} \sum_{j>i} \mu_j g(\tau_{i,j-1}) \right) \exp \left\{ k_0^2 \sum_{2k_s+1=i<j}^{2m} \mu_i \mu_j C(t_{i,j-1}) \right\} \\
& \times \int_0^\infty d\tau_{2m} \int_0^\infty d\tau_{2k_s} \int_0^\infty d\tau_0 \exp\{-\lambda(\tau_0 + \tau_{2k_s} + \tau_{2m})\} \\
& \times \frac{\hbar k_0}{2} g(\tau_{2m}) \hbar k_0 \dot{C}(\tau_{2k_s} + \tau_{2m}) \frac{\hbar k_0^2}{2} \dot{g}(\tau_{2k_s}) . \tag{7.36}
\end{aligned}$$

Der Anteil des hinteren Clusters ist in beiden Ausdrücken identisch. Der Anteil des Graphen vor τ_{2k_s} führt bei I_1 auf das zweite Moment im Tight-Binding-Gitter, während bei I_2 der entsprechende Ausdruck des linearisierten ersten Momentes auftritt. Dagegen erhält man im Kopplungsterm der Interclusterdifferenzzeit τ_{2k_s} mit τ_{2m} das erste bzw. zweite Moment des freien Brownschen Teilchen, wobei die Zuordnung zu I_1 und I_2 diesmal vertauscht ist. Die Struktur der faktorisierten Ausdrücke ist demnach schematisch durch

$$I_1 = I_1^{(k)} + n_2(\lambda) \times n_1^{(k)}(\lambda) \times x_1^{\text{Br}}(\lambda) \times R \tag{7.37}$$

und

$$I_2 = I_2^{(k)} - n_1(\lambda) \times n_1^{(k)}(\lambda) \times x_2^{\text{Br}}(\lambda) \times R \tag{7.38}$$

gegeben. R gibt dabei den Rest an, der Index Br steht für das Brownsche Teilchen. Die abgespaltenen konvergenten Ausdrücke $I_1^{(k)}$ und $I_2^{(k)}$ lassen sich ohne weiteres wie die obigen auswerten, indem man um τ_{2m} herum entwickelt. Unter Berücksichtigung der Tatsache, daß die Einsteinrelation im Tight–Binding–Gitter nach (3.73) sowohl für die vollen Ausdrücke $n_1(\lambda)$ und $n_2(\lambda)$ als auch für die in der Kombinatorik auf einen neutralen Cluster eingeschränkten konvergenten Anteile $n_1^{(k)}(\lambda)$ und $n_2^{(k)}(\lambda)$ gilt und darüberhinaus genauso für das freie Brownsche Teilchen besteht, erhält man erneut die Gültigkeit der Einsteinrelation auch im Cosinuspotential. Demnach verläuft das zweite Moment im superohmschen Regime $1 < s < 2$ ebenfalls für großes Argument linear mit der Zeit.

Kapitel 8

Direkte Abbildung der Systeme

Nachdem wir in Kapitel 6 ausführlich die Dualitätstransformation anhand der expliziten Ausdrücke für die einzelnen Momente diskutiert und formal auf nichtohmsche spektrale Dichten erweitert haben, wollen wir im folgenden die tieferliegenden Gründe dieser Transformation untersuchen. Dabei werden wir uns von der Frage leiten lassen, ob sich die Dualitätstransformation auch schon vor der Auswertung der Pfadintegrale zeigen läßt. Zunächst werden wir den Tight-Binding-Hamiltonian im extremen Tight-Binding-Limes, in dem sich das Teilchen auf einem Gitter bewegt, in ein kontinuierliches Modell überführen. Anschließend werden wir diesen Hamiltonian im Rahmen der klassischen Mechanik betrachten und eine kanonische Transformation durchführen. Dadurch gelangen wir zu einem Modell, in dem sich das Teilchen in einem Cosinuspotential bewegt und über eine generalisierte Impulskoordinate an das Bad gekoppelt ist. Für die weitere Behandlung des Problems werden wir verschiedene Methoden vorstellen. Bei der ersten suchen wir zunächst die Lagrangefunktion auf. Dabei stellen wir fest, daß anschließend das Bad neu diagonalisiert werden muß. Dies führt auf veränderte Eigenfrequenzen und Kopplungskonstanten. Die Transformation der Badfreiheitsgrade führen wir in Anhang B allgemein durch. In der Lagrangefunktion mit diagonalisiertem Bad ist das Teilchen über seine Geschwindigkeitskoordinate mit dem Bad gekoppelt. Um zu einer Kopplung über den Ort des Teilchens zu gelangen, stellen wir die klassischen Bewegungsgleichungen auf und führen eine weitere Transformation der spektralen Dichte durch. In einer zweiten Vorgehensweise bleiben wir die ganze Zeit im Hamiltonformalismus und führen zwei weitere kanonische Transformationen durch. Dabei wird wieder das Bad transformiert und zu einer Kopplung über den Ort übergegangen. Alternativ behandeln wir den Übergang zur Kopplung über den Ort direkt im Pfadintegral. Dies soll einen Einblick in Realzeitrechnungen zur Dynamik liefern. Ausgangspunkt ist die im Bad transformierte Lagrangefunktion vor Einführung der Ortskopplung. Zu diesem Zeitpunkt haben wir noch keine Verquickung von Bad und Teilchen erhalten. Dann können wir die Diagonalelemente der Dichtematrizen in Orts- und Impuls-

darstellung miteinander in Verbindung bringen. Schließlich gelangen wir zu einer allgemeinen Beziehung der reduzierten Dichtematrix im Cosinuspotential und im Tight–Binding–Gitter in Orts- bzw. Impulsdarstellung unter einer Transformation der spektralen Dichte, die mit der in Kapitel 6 durch Vergleich der formal exakten Ausdrücke erhaltenen Transformation (6.21) identisch ist.

8.1 Der Tight–Binding–Hamiltonian

Wir starten mit dem Hamiltonian (3.2) des Tight–Binding–Modells. Die Wannierfunktionen $|n\rangle$ sind im extremen Tight–Binding–Limes mit den Ortsbasisvektoren $|nq_0\rangle$ identisch. In dieser Basis ist der Hamiltonian durch

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar\sigma}{q_0} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} nq_0 |nq_0\rangle \langle nq_0| \\ &\quad - \frac{1}{2} \hbar \Delta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (|nq_0\rangle \langle (n+1)q_0| + |nq_0\rangle \langle (n-1)q_0|) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(\hat{x}_i - \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} nq_0 |nq_0\rangle \langle nq_0| \right)^2 \right\} \quad (8.1)\end{aligned}$$

gegeben. Er wirkt auf den Hilbertraum der komplexwertigen Funktionen $\varphi(n)$ auf Z . Wir erweitern den Hilbertraum nun auf C^∞ –Funktionen $\psi(x)$ mit Definitionsbereich R . Dabei fordern wir

$$\psi(nq_0) = \varphi(n). \quad (8.2)$$

Wegen $\psi(x) \in C^\infty$ sind die Funktionen $\psi(x)$ dadurch eindeutig festgelegt. Der obige Hamiltonian wird durch seine Wirkung

$$\begin{aligned}\hat{H}_c \psi(x) &= -\frac{\hbar\sigma}{q_0} x \psi(x) - \frac{1}{2} \hbar \Delta (\psi(x+q_0) + \psi(x-q_0)) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} x \right)^2 \right\} \psi(x) \quad (8.3)\end{aligned}$$

auf die Wellenfunktionen $\psi(x)$ verallgemeinert. Erneut wegen $\psi(x) \in C^\infty$ können wir die Ortstranslationen durch den Impulsoperator \hat{p} ausdrücken und erhalten

$$\hat{H}_c = -F \hat{x} - \hbar \Delta \cos(\hat{p}q_0/\hbar) + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(\hat{x}_i - \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} \hat{x} \right)^2 \right\} \quad (8.4)$$

mit $F = \hbar\sigma/q_0$. Wir stellen fest, daß er nur Orte im Abstand von q_0 miteinander in Beziehung setzt und damit tatsächlich den Übergang zum kontinuierlichen

Modell richtig beschreibt. Da die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x)$ der Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho}(x, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(x, t) = 0 \quad (8.5)$$

genügt, kann auch der kontinuierliche Hamiltonian zur Beschreibung von Transportvorgängen herangezogen werden.

8.2 Methode 1: Lagrangeformalismus

Zunächst stellen wir eine Methode vor, die am direktesten zur Transformation des Bades führt und zudem auf die quantenmechanische Behandlung mittels Pfadintegralen vorbereitet.

Wir betrachten dazu im folgenden die klassische Form von H_c (8.4), in der Operatoren durch Observablen ersetzt sind. Mittels der kanonischen Transformation

$$\begin{aligned} Q &= p/\eta & P &= -\eta x \\ x &= -P/\eta & p &= \eta Q \end{aligned} \quad (8.6)$$

gelangen wir zu dem Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= F \frac{P}{\eta} - \hbar \Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(x_i + \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} \frac{P}{\eta} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (8.7)$$

mit $\tilde{k}_0 = \eta q_0 / \hbar$, der ein Teilchen im Cosinuspotential mit Kopplung an ein Wärmebad über die Impulskoordinate beschreibt. η ist somit wie in (6.44) in Kapitel 6 ohne Rückgriff auf spektrale Dichten definiert.

8.2.1 Die Lagrangefunktion

Um zur Lagrangefunktion zu kommen, brauchen wir die Beziehung zwischen generalisiertem Impuls P und generalisierter Geschwindigkeit \dot{Q} . Sie erhalten wir über die Hamiltonsche Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial H}{\partial P} = \dot{Q} = \frac{F}{\eta} + \sum_{i=1}^N \frac{C_i}{\eta} \left(\frac{P}{\eta} \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} + x_i \right) \quad (8.8)$$

und lautet

$$P = \frac{\eta^2 \dot{Q} - F\eta - \sum_i C_i x_i \eta}{\eta(0)}. \quad (8.9)$$

Hier haben wir die Beziehung $\eta(0) = \sum_i \frac{C_i^2}{m_i \omega_i^2}$ des Dämpfungskerns $\eta(t)$ (2.19) benutzt. Die Lagrangefunktion ist somit

$$\begin{aligned} L &= \dot{Q}P + \sum_{i=1}^N \dot{x}_i p_i - H \\ &= \frac{1}{2} \frac{(\eta \dot{Q} - F - \sum_i C_i x_i)^2}{\eta(0)} + \hbar \Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 - \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \right]. \end{aligned} \quad (8.10)$$

In ihr sind die Badoszillatoren nicht mehr voneinander entkoppelt, wenn man sich nun das Teilchens als über seine Geschwindigkeit an das Bad gekoppelt denkt. Es tritt vielmehr der Term

$$\frac{1}{2\eta(0)} \left(\sum_i C_i x_i \right)^2 + \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 - \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \right] \quad (8.11)$$

auf. Bevor wir das Bad diagonalisieren werden, beschäftigen wir uns zunächst mit dem Übergang zu einer Kopplung des Teilchens an das Bad über seine Ortskoordinate. Dabei werden wir feststellen, daß wir die spektrale Dichte des Bades modifizieren müssen. Erst danach ist es sinnvoll, die neue Dichte durch Diagonalisierung zu bestimmen. Die allgemeine Diagonalisierung des Bades und die Berechnung der modifizierten transformierten spektralen Dichte wird dann im Anhang B vorgenommen. Es handelt sich um eine wichtige, aber längliche Rechnung.

Der nächste Schritt besteht somit darin, zu einer Kopplung über die Ortskoordinate überzugehen. Dazu ziehen wir die Bewegungsgleichungen des klassischen Systems heran¹. Nach der Diagonalisierung erhält man die Lagrangefunktion

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} \frac{\eta^2}{\eta(0)} (\dot{Q} - F/\eta)^2 + \hbar \Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) \\ &+ \sum'_i \left[\frac{1}{2} M_i \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 y_i^2 - D_i y_i (\dot{Q} - F/\eta) \right] \\ &+ \frac{1}{2} M_0 \dot{y}_0^2 - D_0 y_0 (\dot{Q} - F/\eta). \end{aligned} \quad (8.12)$$

Hier haben wir vorgegriffen und eine Mode mit der Eigenfrequenz 0 herausgenommen. In den weiteren Schritten werden wir aber wieder davon absehen, diese Mode gesondert zu behandeln. Sie spielt erst bei der Transformation der spektralen Dichte eine Rolle. Das Bad koppelt zunächst an die Geschwindigkeiten, ohne daß ein Potentialrenormierungsterm auftritt. Dieser wäre in der Tat nicht von dem kinetischen Term zu unterscheiden. Die neue Masse des Teilchens ergibt sich zu

$$M = \frac{\eta^2}{\eta(0)}. \quad (8.13)$$

¹Der Versuch, bereits die aus (8.7) folgenden klassischen Bewegungsgleichungen zu lösen, scheitert daran, daß die Oszillatoren dort noch nicht entkoppelt sind.

Diese Beziehung haben wir schon in (6.47) erhalten. Man erkennt weiterhin, daß die Kraft nur indirekt, nämlich über das Bad, an das Teilchen angreift.

Die transformierte spektrale Dichte lautet für die Geschwindigkeitskopplung

$$\hat{J}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{D_i^2}{M_i \Omega_i^2} \delta(\omega - \Omega_i) . \quad (8.14)$$

8.2.2 Die Bewegungsgleichungen

Teilchen und Bad gehorchen klassisch den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} M\ddot{Q}(t) - \frac{M}{\eta}\dot{F}(t) - \sum_i D_i \dot{y}_i(t) + V'(Q(t)) &= 0 \\ M_i \ddot{y}_i(t) + M_i \Omega_i^2 y_i(t) + D_i \left(\dot{Q}(t) - \frac{F(t)}{\eta} \right) &= 0 . \end{aligned} \quad (8.15)$$

Nach Fouriertransformation lauten sie

$$\begin{aligned} -M\omega^2 Q(\omega) + i\omega \frac{M}{\eta} F(\omega) + i\omega \sum_i D_i y_i(\omega) + \tilde{V}'(Q) &= 0 \\ -\omega^2 M_i y_i(\omega) + M_i \Omega_i^2 y_i(\omega) - D_i \left(i\omega Q(\omega) + \frac{\tilde{F}(\omega)}{\eta} \right) &= 0 . \end{aligned} \quad (8.16)$$

Setzen wir das Ergebnis

$$y_i(\omega) = \frac{D_i}{M_i(\Omega_i^2 - \omega^2)} \left(i\omega Q + \frac{F(\omega)}{\eta} \right) + \frac{1}{2} A_i \delta(\omega - \Omega_i) + \frac{1}{2} A_i^* \delta(\omega + \Omega_i) \quad (8.17)$$

für die Badoszillatoren oben wieder ein, so lautet die effektive Bewegungsgleichung für das Teilchen

$$\begin{aligned} -M\omega^2 \left(Q(\omega) - \frac{M}{\eta} \frac{F(\omega)}{-i\omega} \right) - \omega^2 \left(Q(\omega) - \frac{M}{\eta} \frac{F(\omega)}{-i\omega} \right) \sum_i \frac{D_i^2}{M_i(\Omega_i^2 - \omega^2)} + \tilde{V}'(Q) \\ = -i\omega \frac{1}{2} \sum_i (D_i A_i \delta(\omega - \Omega_i) - D_i A_i^* \delta(\omega + \Omega_i)) . \end{aligned} \quad (8.18)$$

Mit den Ersetzungen

$$E_i = \Omega_i D_i \quad \text{und} \quad -iA_i = B_i \quad (8.19)$$

gelangt man zu der Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} -M\omega^2 \left(Q(\omega) - \frac{M}{\eta} \frac{F(\omega)}{-i\omega} \right) - i\omega \left(Q(\omega) - \frac{M}{\eta} \frac{F(\omega)}{-i\omega} \right) \sum_i \frac{-i\omega E_i^2}{M_i \Omega_i^2 (\Omega_i^2 - \omega^2)} + \tilde{V}'(Q) \\ = \frac{1}{2} \sum_i (E_i B_i \delta(\omega - \Omega_i) + E_i B_i^* \delta(\omega + \Omega_i)) \end{aligned} \quad (8.20)$$

oder auch

$$-M\omega^2 Q(\omega) + i\omega \frac{M}{\eta} F(\omega) - \eta_{\text{wc}}(\omega) \left(i\omega Q(\omega) + \frac{F(\omega)}{\eta} \right) + \tilde{V}'(Q) = \xi_{\text{wc}}(\omega) . \quad (8.21)$$

Dabei wird der Dämpfungskern

$$\eta_{\text{wc}}(\omega) = -i\omega \sum_i \frac{E_i^2}{M_i \Omega_i^2 (\Omega_i^2 - \omega^2)} \quad (8.22)$$

mit der spektralen Dichte

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \omega^2 \hat{J}(\omega) \quad (8.23)$$

gebildet. Durch das FDT (2.29) ist auch das Spektrum der Rauschkraft ξ_{wc} festgelegt. Im Zeitregime wird das Teilchen demnach durch die Gleichung

$$\begin{aligned} M\ddot{Q}(t) - \frac{M}{\eta} \dot{F}(t) + \int_{-\infty}^t dt' \eta_{\text{wc}}(t-t') \dot{Q}(t') \\ - \int_{-\infty}^t dt' \eta_{\text{wc}}(t-t') F(t') / \eta + V'(Q) = \xi_{\text{wc}}(t) \end{aligned} \quad (8.24)$$

beschrieben. Dies ist eine herkömmliche Langevingleichung. Die Transformation

$$Q'(t) = Q(t) - \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^t F(t') dt' , \quad (8.25)$$

die im Fall einer konstanten Kraft einer Galileitransformation entspricht, führt auf

$$M\ddot{Q}'(t) + \int_{-\infty}^t dt' \eta_{\text{wc}}(t-t') \dot{Q}'(t') + V' \left(Q' + \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^t F(t') dt' \right) = \xi_{\text{wc}}(t) . \quad (8.26)$$

Das Cosinuspotential ist dabei im Falle einer konstanten Kraft im Tight-Binding-Gitter einem konstanten Drift ausgesetzt. Der Lagrangian zu (8.26) lautet

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} \frac{\eta^2}{\eta(0)} \dot{Q}'^2 + \hbar \Delta \cos \left[\tilde{k}_0 \left(Q' + \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^t F(t') dt' \right) \right] \\ & + \sum_i \left[\frac{1}{2} M_i \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 y_i^2 - D_i y_i \dot{Q}' \right] . \end{aligned} \quad (8.27)$$

Da wir es mit einem linearen Modell zu tun haben, können wir nun das Teilchen als über die Ortskoordinate an das Bad gekoppelt ansehen, wenn wir die spektrale Dichte $J_{\text{wc}}(\omega)$ zugrundelegen. Die Koordinaten des zugehörigen Bades bezeichnen wir mit z_i . Es ist zu beachten, daß mit der Einführung der Ortskopplung auch wieder ein Potentialrenormierungsterm in den Lagrangian eingebracht werden muß, damit sich die Langevingleichung (8.24) aus den Bewegungsgleichungen ergibt.

Damit ist die vollständige Abbildung der beiden Systeme aufeinander gelungen. Es verbleibt nur noch die Bestimmung der spektralen Dichte $J_{\text{wc}}(\omega)$ in Anhang B.

Das Ergebnis ist mit der im vorigen Abschnitt erhaltenen verallgemeinerten Dualitätstransformation identisch und lautet somit

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \eta^2 \frac{J_{\text{tb}}(\omega)}{|\eta_{\text{tb}}(\omega)|^2} \quad (8.28)$$

sowie

$$J_{\text{tb}}(\omega) = \eta^2 \frac{\omega^2 J_{\text{wc}}(\omega)}{|M\omega^2 + \tilde{K}_{J_{\text{wc}}}|^2}. \quad (8.29)$$

Die Masse M ist mit der in (8.13) und (6.47) eingeführten identisch.

8.3 Methode 2: Kanonische Transformationen

Die zweite Methode beruht auf drei kanonischen Transformationen, von denen die erste Impuls und Ort des Teilchens austauscht, die zweite das Bad betrifft und der Diagonalisierung des vorigen Abschnittes entspricht und die dritte von der Impulskopplung des Teilchens zur Ortskopplung überführt. Statt kanonischer Transformationen kann man auch unitäre Transformationen am Hamiltonoperator durchführen. Das Ergebnis bleibt dasselbe. Wir diskutieren zunächst das Problem in Abwesenheit der Kraft und führen diese später wieder ein.

Die erste Transformation ist mit (8.6) identisch. Sie lautet

$$\begin{aligned} Q &= p/\eta & P &= -\eta x \\ x &= -P/\eta & p &= \eta Q \end{aligned} \quad (8.30)$$

und führt auf

$$H = -\hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(x_i + \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} \frac{P}{\eta} \right)^2 \right\}. \quad (8.31)$$

Die zweite Transformation wird durch die Forderungen

$$\sum_i \left[\frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 \right] = \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} P_i^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 z_i^2 \right] + \frac{1}{2M} \left(\sum_i \frac{E_i P_i}{M_i \Omega_i^2} \right)^2 \quad (8.32)$$

und

$$\sum_i C_i x_i = -\frac{\eta}{M} \sum_i \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} P_i \quad (8.33)$$

festgelegt. Sie entspricht der Diagonalisierung des Bades (8.11) mit anschließender Vertauschung von Ort und Impuls der Badoszillatoren nach

$$P_i = -M_i\Omega_i y_i \quad \text{und} \quad z_i = \frac{p_i}{M_i\Omega_i}. \quad (8.34)$$

Die spektrale Dichte des Bades ist daher nach dem Ergebnis des Anhangs B mit $J_{\text{wc}}(\omega)$ identisch. Der Hamiltonian lautet nun

$$\begin{aligned} H &= -\hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 x_i^2 + \frac{C_i^2}{2m_i \omega_i^2} \frac{P^2}{\eta^2} + C_i x_i \frac{P}{\eta} \right] \\ &= \frac{P^2}{2M} - \hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) \\ &\quad + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} P_i^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 z_i^2 - \frac{E_i P_i}{M_i \Omega_i^2} \frac{P}{M} \right] + \frac{1}{2M} \left(\sum_i \frac{E_i P_i}{M_i \Omega_i^2} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2M} \left(P - \sum_i \frac{E_i P_i}{M_i \Omega_i^2} \right)^2 - \hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} P_i^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 z_i^2 \right]. \end{aligned} \quad (8.35)$$

Als nächsten Schritt führen wir die Transformation

$$\begin{aligned} \tilde{P} &= P - \sum_i \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} P_i = -\eta x + C_i x_i \frac{M}{\eta}; \\ \tilde{z}_i &= z_i + \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} Q; \quad \tilde{P}_i = P_i; \quad \tilde{Q} = Q \end{aligned} \quad (8.36)$$

durch. Man rechnet leicht nach, daß die Poissonklammern invariant sind. Es handelt sich also erneut um eine kanonische Transformation. Sie geht von der Impuls- zur Ortskopplung über. Man erhält den Hamiltonian

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{P}^2}{2M} - \hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 \tilde{Q}) + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} \tilde{P}_i^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 \left(\tilde{z}_i - \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} \tilde{Q} \right)^2 \right], \quad (8.37)$$

der ein Teilchen im Cosinuspotential beschreibt.

Um das Wirken einer Kraft zu beschreiben, benötigen wir die Gleichungen

$$-F_{\text{wc}} \tilde{Q} = -F_{\text{wc}} p/\eta \quad \text{und} \quad -F_{\text{tb}} x = \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} (\tilde{P} + \sum_i \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} \tilde{P}_i). \quad (8.38)$$

Die Kraft im Tight-Binding-Gitter kann etwa durch eine zeitabhängige Transformation mit der Erzeugenden

$$F_2(P', \tilde{Q}, P'_i, \tilde{z}_i, t) = P' \left(\tilde{Q} - \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^t F_{\text{tb}}(t') dt' \right) + \sum_i P'_i \left(\tilde{z}_i - \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^t F_{\text{tb}}(t') dt' \right) \quad (8.39)$$

behandelt werden. Wir bezeichnen im folgenden der Kürze wegen das Zeitintegral der Tight–Binding–Kraft mit

$$\int_{-\infty}^t F_{\text{tb}}(t') dt' = \int F_{\text{tb}} . \quad (8.40)$$

Der Hamiltonian erhält dadurch den Zusatzterm

$$\frac{\partial F_2(P', \tilde{Q}, P'_i, \tilde{z}_i, t)}{\partial t} = -\frac{F_{\text{tb}}}{\eta} (P' + \sum_i \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} P'_i) , \quad (8.41)$$

der den Kraftterm aus dem Cosinuspotential genau kompensiert. Der Potentialterm wird zu

$$V(Q') = -\hbar\Delta \cos[\tilde{k}_0(Q' + \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}})] , \quad (8.42)$$

der Badanteil und der kinetische Term bleiben jedoch völlig unverändert. Die letzte Transformation entspricht mithin der Transformation (8.25). Die zugehörige Langevingleichung ist (8.26), der Lagrangian ist (8.27). Auch in diesem Punkt reproduzieren wir also die Ergebnisse von Methode 1. Der Hamiltonian

$$H' = \frac{P'^2}{2M} - \hbar\Delta \cos[\tilde{k}_0(Q' + \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}})] + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} P_i'^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 (z'_i - \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} Q')^2 \right] \quad (8.43)$$

ist demnach dem Tight–Binding–Hamiltonian (8.4)

$$H_c = -F_{\text{tb}}x - \hbar\Delta \cos(pq_0/\hbar) + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} x \right)^2 \right\} \quad (8.44)$$

zugeordnet.

Wir wollen kurz eine andere Betrachtungsweise einschieben, in der die Methoden 1 und 2 gemischt werden. Sie besteht in der von Caldeira und Leggett in [3] angegebenen Transformation

$$M_i \Omega_i z_i = M_i \dot{y}_i + D_i Q , \quad (8.45)$$

die ausgehend von der Lagrangefunktion (8.12) ebenfalls zu einer Kopplung über die Ortskoordinate mit derselben Modifikation der spektralen Dichte um den Faktor ω^2 führt. Diese Transformation führt man am besten wieder als kanonische Transformation im Hamiltonian durch. Der Hamiltonian zur Lagrangefunktion (8.12) lautet nach Durchführung der partiellen Integration

$$y_i(\dot{Q} - \frac{F}{\eta}) \rightarrow -\dot{y}_i(Q - \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}}) , \quad (8.46)$$

die in ihrer Wirkung der dritten kanonischen Transformation (8.36) der Methode 2 entspricht,

$$H = \frac{1}{2M} \left(P + M \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} \right)^2 - \hbar \Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i} \left(p_i - D_i \left(Q - \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 y_i^2 \right]. \quad (8.47)$$

Mit der zeitabhängigen kanonischen Transformation

$$P_i = \frac{D_i F_{\text{tb}}}{\Omega_i \eta} - M_i \Omega_i y_i \quad \text{und} \quad z_i = \frac{p_i + D_i \int F_{\text{tb}} / \eta}{M_i \Omega_i} \quad (8.48)$$

sowie $E_i = D_i \Omega_i$ gelangt man zu

$$H = \frac{1}{2M} \left(P + M \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} \right)^2 - \hbar \Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) + \sum_i \left[\frac{1}{2} M_i \Omega_i^2 \left(z_i - \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} Q \right)^2 + \frac{1}{2M_i} P_i^2 + \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} \frac{E_i}{M_i \Omega_i^2} P_i \right]. \quad (8.49)$$

Dies entspricht mit (8.38) dem Hamiltonian \tilde{H} (8.37).

8.4 Methode 3: Dichtematrix und Influenzfunktional

8.4.1 Die Dichtematrix

Um die Abbildung zwischen den beiden Systemen in Realzeit wieder auf die Quantenmechanik zu übertragen, kehren wir in den Dichtematrixformalismus zurück. Der lineare Charakter des Bades blieb jederzeit erhalten. Daher bietet sich wieder der Pfadintegralformalismus und für faktorisierende Anfangsbedingungen die Influenzfunktionaltechnik als geeignete Methode an. Für ihre Anwendung ist jedoch die Kenntnis der genauen Form der Anfangsbedingungen notwendig.

Zunächst stellen wir fest, daß wir bei der Transformation (8.36) eine Verquickung der Badfreiheitsgrade mit denen des Teilchens erhalten haben. Geht man von thermischen Anfangsbedingungen aus und betrachtet die reduzierte Dichtematrix des Cosinuspotentials in Ortsdarstellung, so haben wir es mit einem Freiheitsgrad zu tun, der nur von der Transformation (8.25) beeinflußt wird. Daher läßt sich ausgehend von den bisherigen Ergebnissen sofort die Beziehung

$$\rho_{\text{wc}}^q(Q'_1, Q'_2, t) = \eta \rho_{\text{tb}}^p(\eta Q'_1, \eta Q'_2, t) \quad (8.50)$$

zwischen den reduzierten Dichtematrizen in Orts- und Impulsdarstellung der Systeme formulieren, die durch die Hamiltonians (8.4) und (8.43) beschrieben werden. Insbesondere für verschwindende Kräfte ist dies eine direkte Abbildung von Cosinuspotential und Tight-Binding-Gitter, während man für endliche Kräfte ein driftendes Cosinuspotential erhält. Die Skalierung der Dichtematrix erwächst aus der Forderung nach der Normierung der Dichtematrix über ihre Spur auf 1. Fouriertransformation führt zur invertierten Darstellung

$$\rho_{\text{wc}}^p(P'_1, P'_2, t) = \frac{1}{\eta} \rho_{\text{tb}}^q(P'_1/\eta, P'_2/\eta, t). \quad (8.51)$$

Dies ist erstaunlich, da ja bei der Bildung von P' nach (8.36) die Badfreiheitsgrade mit einbezogen werden.

Thermische Anfangsbedingungen transformieren sich bei den obigen Umformungen in ebensolche. Es ist aber wohl in der Regel so, daß man ausgehend von physikalisch sinnvollen Anfangsbedingungen nach der Transformation qualitativ andersgeartete erhält. Insbesondere die Natur des Anfangszustand des Bades ist aber in realen Systemen meist fest vorgegeben. Behandelt man zum Beispiel die Realzeitdynamik im Rahmen faktorisierender Anfangsbedingungen, so erkennt man, daß im Anschluß an die Transformationen, die etwa zu (8.37) oder (8.43) führen, Bad und Teilchen nicht mehr faktorisieren. Daher werden wir versuchen, nur die Diagonalisierung des Bades durchzuführen und anschließend ausgehend vom Lagrangian (8.12) im Pfadintegralformalismus weiterzuschreiten, um die Ortskopplung des Teilchens ans Bad einzuführen.

8.4.2 Ortskopplung und Influenzfunktional

Um weiterhin mit faktorisierenden Anfangsbedingungen rechnen zu können, muß man die Kopplung über die Geschwindigkeiten direkt im Pfadintegral betrachten. Wie wir sehen werden, kann man sie dort durch partielle Integration in eine Kopplung an die Ortskoordinaten überführen. Ausgangspunkt ist somit die Lagrangefunktion (8.12), die wir nach kanonischer Transformation und Diagonalisierung des Bades aus dem Hamiltonian (8.4) erhalten haben. Die Diagonalisierung des Bades führt zu einer Transformation des Badanteils der faktorisierenden Anfangsbedingungen, der anschließend durch

$$\hat{\rho}_{\text{Bad}}(0) = \frac{1}{Z} \exp\left\{-\beta\left[\sum_i \left(\frac{1}{2}M_i \dot{y}_i^2 + \frac{1}{2}M_i \Omega_i^2 y_i^2\right) - \frac{1}{M} \left(\sum_i D_i y_i\right)^2\right]\right\} \quad (8.52)$$

gegeben ist. Diese Transformation folgt aus (8.11) oder über die Transformation der Anfangsbedingungen des Teilchens

$$\dot{Q}(x=0, p=0) - \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} = -\frac{1}{M} \sum_i D_i y_i \quad (8.53)$$

und mit $L_{\text{Bad}} = L(x=0, p=0)$ in (8.12). Man erhält also einen Zusatzterm. Er führt auf ein verändertes Influenzfunktional. Da wir die Transformationsvorschrift der einzelnen Badoszillatoren nicht kennen, gehen wir hypotetisch davon aus, daß für große Zeiten kein Unterschied besteht, wenn man (8.52) durch die thermischen Anfangsbedingungen

$$\hat{\rho}_{\text{Bad}}(0) = \frac{1}{Z'} \exp\left\{-\beta\left[\sum_i \left(\frac{1}{2}M_i \dot{y}_i^2 + \frac{1}{2}M_i \Omega_i^2 y_i^2\right)\right]\right\} \quad (8.54)$$

ersetzt. Da die Oszillatoren in der Regel unkorreliert sind, scheint diese Annahme nicht ohne Sinn zu sein.

Die spektrale Dichte des Bades ist durch $\hat{J}(\omega)$ gegeben. Die propagierende Funktion der reduzierten Dichtematrix läßt sich bei thermischen Anfangsbedingungen auch für die Lagrangefunktion (8.27) formal exakt als gekoppeltes Pfadintegral hinschreiben. Die Behandlung der Badoszillatoren geschieht dabei in gleicher Weise wie bei der herkömmlichen Kopplung zwischen Bad und Teilchen über den Ort. Der Counterterm taucht allerdings nicht mehr auf, da er in (8.27) fehlt. Die Influenzphase ist dann durch

$$\Phi_{\text{fac}}[q, q'] = \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\dot{\tilde{q}}(t') - \dot{\tilde{q}}'(t')] [\hat{K}(t' - t'')\dot{\tilde{q}}(t'') - \hat{K}^*(t' - t'')\dot{\tilde{q}}'(t'')] \quad (8.55)$$

gegeben. Geht man von (8.12) aus, so erhält man noch den Term

$$\frac{1}{\eta} \frac{2}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\dot{\tilde{q}}(t') - \dot{\tilde{q}}'(t')] \hat{K}_2(t' - t'') F_{\text{tb}}(t''). \quad (8.56)$$

Hier kann man eine partielle Integration durchführen. Ersetzung von $\hat{J}(\omega)$ durch $J_{\text{wc}}(\omega)/\omega^2$ sowie (B.18) ergibt, daß man $\hat{K}_2(t)$ unter Berücksichtigung der Lage der Pole durch $\eta_{\text{wc}}(t)/2$ ersetzen kann. Damit erhält man den Kraftterm, der schon in (8.24) auftrat. Im folgenden gehen wir wieder von (8.27) aus.

Zur Motivation des weiteren Vorgehens wollen wir uns die Form (3.13) der Influenzphase in Erinnerung rufen. Sie ist in der dort angegebenen Form nur für die Randbedingungen $q_i = q'_i = 0, q_f = q'_f$ richtig. Exakt lautet die Beziehung

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{fac}}[q, q'] &= \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [q(t') - q'(t')] [K(t' - t'')q(t'') - K^*(t' - t'')q'(t'')] \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \eta(0) [q^2(t') - q'^2(t')] \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [q(t') - q'(t')] [M(t')q(0) - M^*(t')q'(0)] \end{aligned} \quad (8.57)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\eta(0)}{2} \int_0^t dt' [q(0) - q'(0)][q(t') - q'(t')] \\
& + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [q(t) - q'(t)][Q'(t-t')q(t') - Q'^*(t-t')q'(t')] \\
& - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\dot{q}(t') - \dot{q}'(t'')] [Q'(t'-t'')\dot{q}(t'') - Q'^*(t'-t'')\dot{q}'(t'')] .
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir die neue Größe

$$M(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \left[\coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) \sin(\omega t) + i \cos(\omega t) \right] \quad (8.58)$$

eingeführt. Der Geschwindigkeitskorrelationsterm

$$Q'(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \frac{\cosh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) - \cosh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2} - i\omega t\right)}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)} \quad (8.59)$$

unterscheidet sich von $Q(t)$ aus (3.17) in Kapitel 3 nur durch die Konstante q_0^2/\hbar .

Wir betrachten im folgenden die Situation, in der der Weg des Teilchens bei $Q = 0$ startet und auf der Diagonalen endet. Wir befassen uns also mit der propagierenden Funktion $J_{\text{tb}}(p, p, t; 0, 0, 0)$ im Impulsraum. Dann verschwinden die ersten drei Terme der rechten Seite von (8.57), und man gelangt zu der schon in Kapitel 3 angegebenen Form der Influenzphase.

An der Stelle von $Q'(t)$ steht in (8.55) die Größe $-\hat{K}(t)$. Führt man nun wieder $J_{\text{wc}}(\omega) = \omega^2 \hat{J}(\omega)$ ein, so sind beide Ausdrücke abgesehen von dem Term

$$\Delta Q'(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{\text{wc}}(\omega)}{\omega^2} \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right)$$

identisch. Er ist aber zeitunabhängig und liefert einen Beitrag proportional zu $(\tilde{y}_f - \tilde{y}_i)^2$ zur Influenzphase, der für Wege von der Diagonalen zur Diagonalen zurück verschwindet. Tatsächlich steht er nur in $Q'(t)$, damit der Integrand des Frequenzintegrals an der unteren Integrationsgrenze integrierbar ist. Es steht uns jedoch frei, auch eine andere Form für diesen Korrekturterm zu wählen. Wir können ihn also ignorieren. Weiterhin stellen wir fest, daß auch die 0-Mode einen solchen konstanten Beitrag zu \hat{K} liefert. Daher können wir $\hat{K}(t)$ durch $-Q'_{\text{wc}}(t)$ ersetzen, wobei letztere Größe mit $J_{\text{wc}}(\omega)$ gebildet wird. Die Influenzphase erhält also die Form

$$\Phi_{\text{fac}}[q, q'] = \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [q(t') - q'(t')] [K_{\text{wc}}(t'-t'')q(t'') - K_{\text{wc}}^*(t'-t'')q'(t'')] . \quad (8.60)$$

Wir stellen somit fest, daß sich auch im Pfadintegralformalismus der Übergang zur Kopplung an die Ortskoordinate vollziehen läßt, wenn man geeignete Matrixelemente betrachtet. Dabei werden Bad und Teilchen zu jedem Zeitpunkt getrennt behandelt. Man erhält erneut eine Beziehung zwischen den Dichtematrizen in Orts- und Impulsdarstellung in der Art von (8.50). Allerdings kann die vorgestellte Betrachtungsweise wegen der Hypothese thermischer Anfangsbedingungen nach Durchführung der Transformation nicht als abgeschlossen gelten.

8.5 Erweiterung auf allgemeine periodische Potentiale

In unserer gesamten Herleitung haben wir die explizite Form

$$V(Q) = -\hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q) \quad (8.61)$$

des Potentials im Anschluß an die kanonische Transformation nicht mehr benötigt. Daher läßt sich das Ergebnis zwanglos auf allgemeine periodische Potentiale verallgemeinern. Führt man eine Fourierreihenzerlegung

$$V(Q) = \frac{1}{2} \sum_n [V_n \exp(in\tilde{k}_0 Q) + W_n \exp(-in\tilde{k}_0 Q)] \quad (8.62)$$

durch, so erhält man für das zugehörige Tight-Binding-Gitter einen Hamiltonian, dessen Tunnelterm durch

$$H_T = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (V_m |n\rangle \langle (n-m)| + W_m |n\rangle \langle (n+m)|) \quad (8.63)$$

gegeben ist. Er erlaubt auch Sprünge zu nicht benachbarten Mulden. Für reelle Potentiale ist er hermitesch. Die Tunnelmatrixelemente sind i. a. allerdings komplex.

8.6 Mobilität und Korrelationsfunktionen

Nun wenden wir uns der Abbildung der Mobilität und der Korrelationsfunktionen des Teilchens im Tight-Binding-Potential und im Cosinuspotential zu. Dabei gehen wir von den Hamiltonians H_c (8.4) und \tilde{H} (8.37) sowie H' (8.43) aus. Wir diskutieren getrennt die Fälle, in denen das Teilchen im Tight-Binding-Gitter bzw. im Cosinuspotential einer Kraft ausgesetzt ist, die sich nach (8.38) transformiert.

8.6.1 Kraft im Cosinuspotential

Dem Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{\tilde{P}^2}{2M} - \hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0\tilde{Q}) - F_{\text{wc}}\tilde{Q} \\ &+ \sum_i \left[\frac{1}{2M_i}\tilde{P}_i^2 + \frac{1}{2}M_i\Omega_i^2\left(\tilde{z}_i - \frac{E_i}{M_i\Omega_i^2}Q\right)^2 \right] \end{aligned} \quad (8.64)$$

ist der Tight–Binding–Hamiltonian

$$\begin{aligned} H_c &= -\frac{F_{\text{wc}}}{\eta}p - \hbar\Delta \cos(pq_0/\hbar) \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i}p_i^2 + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i}{m_i\omega_i^2}x \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (8.65)$$

zugeordnet. Statt im Cosinuspotential nach $\langle \dot{Q}(t) \rangle$ zu suchen, kann man also auch

$$\langle \dot{p}(t) \rangle = \eta \langle \dot{Q}(t) \rangle \quad (8.66)$$

im Tight–Binding–Gitter in Antwort auf den Kraftterm $-pF_{\text{wc}}/\eta$ im Hamiltonian betrachten. Dem entspricht die Abbildung der Korrelationsfunktionen nach

$$\begin{aligned} \langle \tilde{Q}(t)\tilde{Q}(t') \rangle &= \frac{1}{\eta^2} \langle p(t)p(t') \rangle ; \\ \langle \tilde{Q}(t)\dot{\tilde{Q}}(t') \rangle &= \frac{1}{\eta^2} \langle p(t)\dot{p}(t') \rangle . \end{aligned} \quad (8.67)$$

Wir definieren die dynamische Mobilität im Impulsraum des Teilchens, das einem Kraftterm $-F_{\text{tb}}^p p$ im Tight–Binding–Hamiltonian ausgesetzt ist, nach

$$\langle \dot{p}(\omega) \rangle = \mu_{\text{tb}}^p(\omega) F_{\text{tb}}^p(\omega) \quad (8.68)$$

und erhalten mit $F_{\text{tb}}^{p'} = \frac{1}{\eta}F_{\text{wc}}$

$$\mu_{\text{wc}}^q(\omega) = \frac{1}{\eta} \mu_{\text{tb}}^p(\omega) . \quad (8.69)$$

Dies kann man im Zusammenhang mit dem Ergebnis

$$\eta \mu_{\text{wc}}^q(\omega) = 1 - \mu_{\text{wc}}^p(\omega) \quad (8.70)$$

von Zaikin und Panyukov im Falle ohmscher spektraler Dichten sehen [32, 33]. Im Impulsraum erhält man

$$\langle \tilde{P}(t) \rangle = -\eta \langle x(t) \rangle + \frac{M}{\eta} \sum_i C_i \langle x_i(t) \rangle = \frac{M}{\eta} \langle \dot{\tilde{p}}(t) \rangle \quad (8.71)$$

und

$$\langle \dot{\tilde{P}}(t) \rangle = \frac{M}{\eta} \langle \ddot{\tilde{p}}(t) \rangle . \quad (8.72)$$

Dies folgt auch direkt aus (8.66). Daher ergibt sich für die Mobilitäten

$$\mu_{\text{wc}}^p(\omega) = \frac{M}{\eta} \mu_{\text{tb}}^{\dot{p}}(\omega) . \quad (8.73)$$

8.6.2 Kraft im Tight–Binding–Gitter

Bringen wir in den Tight–Binding–Hamiltonian eine Kraft über $-F_{\text{tb}}x$ ein, so entsprechen die Hamiltonians

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{\tilde{P}^2}{2M} - \hbar\Delta \cos[\tilde{k}_0\tilde{Q}] + \frac{F_{\text{tb}}}{\eta}\tilde{P} \\ &+ \sum_i \left[\frac{1}{2M_i}P_i^2 + \frac{1}{2}M_i\Omega_i^2 \left(z_i - \frac{E_i}{M_i\Omega_i^2}\tilde{Q} \right)^2 + \frac{F_{\text{tb}}}{\eta} \sum_i \frac{E_i}{\Omega_i^2 M_i} P_i \right] \end{aligned} \quad (8.74)$$

beziehungsweise

$$H' = \frac{P'^2}{2M} - \hbar\Delta \cos\left[\tilde{k}_0 \left(Q' + \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}} \right) \right] + \sum_i \left[\frac{1}{2M_i}P_i'^2 + \frac{1}{2}M_i\Omega_i^2 \left(z'_i - \frac{E_i}{M_i\Omega_i^2}Q' \right)^2 \right] \quad (8.75)$$

im Cosinuspotential dem Tight–Binding–Hamiltonian

$$\begin{aligned} H_c &= -F_{\text{tb}}x - \hbar\Delta \cos(pq_0/\hbar) \\ &+ \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m_i}p_i^2 + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 \left(x_i - \frac{C_i}{m_i\omega_i^2}x \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (8.76)$$

mit

$$\tilde{Q} = Q' + \frac{1}{\eta} \int F_{\text{tb}} = \frac{p}{\eta} \quad (8.77)$$

unter Verwendung der Abkürzung (8.40) und

$$\begin{aligned} \tilde{P} &= P' = -\eta x + \frac{M}{\eta} \sum_i C_i x_i ; \\ x &= -\frac{1}{\eta} \sum_i \frac{E_i}{M_i\Omega_i^2} P'_i - \frac{1}{\eta} P' . \end{aligned} \quad (8.78)$$

Für kleine Kräfte können wir den Potentialterm entwickeln und erhalten

$$V(Q') = -\hbar\Delta \cos(\tilde{k}_0 Q') + q_0 \Delta \sin(\tilde{k}_0 Q') \int F_{\text{tb}} . \quad (8.79)$$

Da wir die dynamische Mobilität berechnen wollen, setzen wir eine oszillatorische Kraft $F_{\text{tb}}(t) = F \exp(-i\omega t)$ an. Damit ergibt sich für die Korrelationsfunktionen

$$\langle x(t)\dot{x}(t') \rangle = \frac{(\Delta q_0)^2}{-i\omega} \langle \sin(\tilde{k}_0 Q'(t)) \sin(\tilde{k}_0 Q'(t')) \rangle \quad (8.80)$$

und nach erneuter Differentiation

$$\langle \dot{x}(t)\dot{x}(t') \rangle = (\Delta q_0)^2 \langle \sin(\tilde{k}_0 Q'(t)) \sin(\tilde{k}_0 Q'(t')) \rangle. \quad (8.81)$$

Im Frequenzraum erhält man

$$-\omega^2 \langle x x \rangle_\omega = (\Delta q_0)^2 \langle \sin(\tilde{k}_0 Q') \sin(\tilde{k}_0 Q') \rangle_\omega. \quad (8.82)$$

Genau dasselbe Ergebnis erhält man auch ausgehend von H' . Dies entspricht den Erwartungen, da für verschwindende Kraft H' und \tilde{H} identisch sind. Alle aufgeführten Relationen kann man sowohl durch direkte Übersetzung als auch unter Ausnutzung der Bewegungsgleichungen in beiden Systemen ansehen.

Behandelt man die nichtlineare Mobilität im Rahmen von Realzeitrechnungen, so muß man den Erwartungswert des Geschwindigkeitsoperator des Hamiltonians \hat{H}_c

$$\dot{\hat{x}} = q_0 \Delta \sin(\hat{p}q_0/\hbar) \quad (8.83)$$

betrachten. Ihn bildet man in der Impulsdarstellung über

$$\langle \dot{\hat{x}}(t) \rangle_{\text{tb}} = q_0 \Delta \int dp \sin(pq_0/\hbar) \rho_{\text{tb}}^p(p, p, t). \quad (8.84)$$

Wie wir gesehen haben, ist die Dichtematrix in Impulsdarstellung im Tight-Binding-Modell mit derjenigen in Ortsdarstellung im Cosinuspotential über (8.50) verknüpft. Dies führt auf

$$\langle \dot{\hat{x}}(t) \rangle_{\text{tb}} = q_0 \Delta \int dx \sin(\tilde{k}_0 x) \rho_{\text{wc}}^x(x, x) \quad (8.85)$$

mit der Dichtematrix ρ_{wc}^x des Cosinuspotentials in Ortsdarstellung. Wird an das Teilchen eine konstante Kraft F_{tb} angelegt, so ist die nichtlineare Mobilität durch

$$\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \dot{\hat{x}}(t) \rangle}{F} \quad (8.86)$$

gegeben.

Kapitel 9

Modellsysteme, Experimente und Anwendungen

Ziel der Physik ist die Beschreibung der Natur. Daher wenden wir uns nun der experimentellen Überprüfbarkeit unserer Ergebnisse zu und diskutieren in diesem Rahmen realistische dissipative Systeme. Wir konzentrieren uns auf den Transport in Metallen und Josephsonkontakte mit Coulombblockade.

9.1 Transport schwerer geladener Teilchen in Metallen

Ein geladenes Teilchen in einem Festkörper bewegt sich durch seine Wechselwirkung mit den Gitteratomen in einem periodischen Potential. Daneben steht es in Wechselwirkung mit den Bandelektronen. Bei endlichen Temperaturen treten Anregungen der Elektronen im Band und Gitterschwingungen auf und setzen das Teilchen dissipativen Effekten aus. Am einfachsten ist der Fall eines fremden Teilchens im Festkörper, da dann allein die Coulombwechselwirkung zu betrachten ist und Austauschenergien, die aus der Ununterscheidbarkeit von Teilchen herrühren, nicht auftreten. Als Beispiel seien Myonen und Protonen sowie Wasserstoff in Metallen genannt, aber auch schwere Ionen in ^3He oder schwere und daher lokalisierte d -Elektronen in Übergangselementen können im Prinzip so betrachtet werden. Die Anwesenheit eines solchen Teilchens führt andererseits zu einer Rückwirkung auf den Festkörper, der durch Abschirmung und Verzerrung auf das von außen eingebrachte Teilchen reagiert. Daher kann man sowohl an der Dynamik des Teilchens als auch an der des Festkörpers Interesse finden, und da das Teilchen beim Transport die abschirmende Wolke der leichten Bandelektronen mitschleppt, sind beide Aspekte nicht unabhängig voneinander. Betrachtet man

ein Teilchen, das viel schwerer ist als die Bandelektronen, so lassen sich letztere als Wärmebad behandeln.

Ausgangspunkt der Betrachtungen [44]–[54], [95]–[98] ist dann ein Hamiltonian, in dem die Kopplung an die Phononen über die Coulombwechselwirkung eingebracht wird, während die Elektronen in der Nähe der Fermikante in der Regel als Fermigas betrachtet werden und durch

$$H_{\text{int}}^{(\text{el})} = \frac{1}{L} \sum_n \sum_{k,k',\sigma} V_{kk'} C_n^+ C_n c_{k,\sigma}^+ c_{k',\sigma} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_n\} \quad (9.1)$$

mit dem Teilchen wechselwirken. C_n^+ und C_n sind Erzeuger und Vernichter des Teilchens am Ort \mathbf{R}_n , während $c_{k,\sigma}^+$ und $c_{k',\sigma}$ auf die Elektronen wirken. Unter Vernachlässigung von Mehrfachanregungen in einen Zustand über der Fermikante können die Anregungen der Elektronen als bosonisches Bad betrachtet werden [45]. Die effektive euklidische Wirkung lautet

$$S_{\text{E}}^{(\text{el})}[\mathbf{q}] = \frac{3}{2k_{\text{F}}^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' K(\tau - \tau') \left(1 - \frac{\sin^2(k_{\text{F}}|\mathbf{q}(\tau) - \mathbf{q}(\tau')|)}{(k_{\text{F}}|\mathbf{q}(\tau) - \mathbf{q}(\tau')|)^2} \right). \quad (9.2)$$

Sie unterscheidet sich von der bekannten Form der Influenzphase durch ihren nichtlinearen Charakter in der Teilchenkoordinate. Er hat seinen Ursprung in dem Exponentialterm von (9.1). Betrachtet man lokalisierte Phänomene, bei denen $k_{\text{F}}|\mathbf{q}(\tau) - \mathbf{q}(\tau')| \ll 1$ mit dem Fermiimpuls k_{F} erfüllt ist, so kann die Wirkung linearisiert werden. Die Zustandsdichte der Fermionen an der Fermikante ist konstant. Insgesamt gelangt man dann zu einem Caldeira–Leggett–Hamiltonian, dessen spektrale Dichte vom ohmschen Typ ist. Mobilität und Diffusionskonstante sind direkt überprüfbare Größen.

Die Entwicklung der Exponentialfunktion in der Wechselwirkung (9.1) mit dem Fermigas und der Wirkung (9.2) ist für die Behandlung diffusiver Teilchen kritisch [44]–[53]. Führt man sie nicht aus, so muß das Influenzfunktional modifiziert werden. Da das Bad davon nicht beeinflusst wird, läuft dies im wesentlichen auf eine Ersetzung von q durch $\exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{q}\}$ und eine Modifizierung der Kopplungskonstanten $V_{kk'}$ bzw. der spektralen Dichte $J(\omega)$ hinaus. Waxman [54] erhielt dagegen mit etwas anderen Annahmen auch für den Transport über ausgedehnte Gebiete ein Influenzfunktional, das mit dem Ausdruck für ein Bad harmonischer Oszillatoren übereinstimmt.

Die Wechselwirkung mit den Phononen läßt sich durch den Wechselwirkungsterm

$$H_{\text{int}}^{(\text{ph})} = \frac{1}{L} \sum_n \sum_k \left(-\frac{\partial v(q - R_n)}{\partial q} \right) (b_k^+ \exp\{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n\} + b_k \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n\}) \quad (9.3)$$

beschreiben [52]. b_k^+ und b_k sind Erzeuger und Vernichter von Phononen, während $v(q - R_n)$ das Potential der Wechselwirkung mit den schwingenden Gitteratomen

darstellt. Auch hier tritt ein Faktor $\exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n\}$ auf, der zu einem Influenzfunktional führt, das nicht mehr bilinear ist.

Longitudinal–optische Phononen ergeben in der Einsteinnäherung $\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{\text{lo}}$ der Dispersionsrelation eine effektive euklidische Wirkung

$$S_E^{(\text{lo})}[\mathbf{q}] = -\alpha \left(\frac{\hbar^3 \omega_{\text{lo}}^2}{2M} \right)^{1/2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau'} d\tau' \frac{D_{\omega_{\text{lo}}}(\tau - \tau')}{|\mathbf{q}(\tau) - \mathbf{q}(\tau')|}. \quad (9.4)$$

Die bosonische Greensche Funktion, die uns schon in (2.80) begegnete, lautet

$$D_\omega(\tau) = \frac{\cosh[\omega(\hbar\beta/2 - |\tau|)]}{\sinh(\omega\hbar\beta/2)}. \quad (9.5)$$

α ist eine dimensionslose Konstante und läßt sich durch Modellparameter wie etwa die Dielektrizitätskonstante ausdrücken [30].

Bei der Kopplung an akustische Phononen lautet ihr Beitrag zur effektiven euklidischen Wirkung

$$S_E^{(\text{ak})}[\mathbf{q}] = \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_{\mathbf{k}}^2}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' D_{\omega_{\mathbf{k}}}(\tau - \tau') \{1 - \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{q}(\tau) - \mathbf{q}(\tau'))]\}. \quad (9.6)$$

Erneut tritt die bosonische Greensche Funktion (9.5) auf. Daneben treten die Kopplungskonstanten $g_{\mathbf{k}}$ auf. Für die Kopplung an akustische Phononen ist die Entwicklung der Exponentialfunktion im Gegensatz zum Fall der Kopplung an das Fermibad ohne Probleme durchführbar. Der erste nichtverschwindende Term ist der quadratische, so daß man erneut zu einer bilinearen effektiven Wirkung gelangt. Der Vergleich mit (2.80) und (2.164) zeigt, daß dies gerade der Form eines Bades harmonischer Oszillatoren entspricht.

Die Form

$$J(\omega) = \frac{\pi}{D} \rho(\omega) \frac{g^2(\omega) k^2(\omega)}{\hbar\omega} \quad (9.7)$$

der spektralen Dichte für den Fall einer isotropen Wechselwirkung haben wir bereits in (2.8) zur Illustration angegeben. Abhängig von der Kristallsymmetrie ist ihr Niederfrequenzverhalten in drei Dimensionen durch einen Exponenten $s = 3$ oder $s = 5$ gegeben, während die Berücksichtigung der Phonon–Phonon–Wechselwirkung zu einer ohmschen spektralen Dichte mit $s = 1$ führt [99].

Experimente wurden etwa für die Diffusion von Myonen und Protonen in Cu, Al und Sc [100]–[102], Defekten in mesoskopischen Metallen [103] und Wasserstoff in Nb [104]–[106] durchgeführt.

9.2 Josephsonkontakte mit Coulombblockade

Die Behandlung des Einflusses von Dissipation auf das Verhalten von Josephsonkontakten und SQUIDs im Rahmen der Influenzfunktionaltechnik und des Caldeira–Leggett–Modells bildet eine der zentralen Anwendungsmöglichkeiten dieser Theorie und liefert darüberhinaus Einblick in die Auswirkungen der Quantenmechanik auf makroskopische Systeme [2], [23]–[43], [51], [65]. Einen umfassenden Überblick gibt [29]. Nach der Ginzburg–Landau–Theorie können Supraleiter durch einen makroskopischen Ordnungsparameter ϕ beschrieben werden [107]. Er stellt sich als Phase einer makroskopischen Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \sqrt{n(x, t)} \exp\{i\phi(x, t)\} \quad (9.8)$$

dar, deren Betragsquadrat die räumliche Dichte der Cooperpaare angibt. Mathematisch elegant wird sie durch die Hubbard–Stratonovich–Transformation eingeführt. Sie dient dabei der Linearisierung der Wechselwirkung zwischen den Cooperpaaren. Im folgenden werden wir die Phase $\phi(x, t)$ und die Dichte $n(x, t)$ im Innern des Supraleiters als räumlich konstant ansehen. Bringt man zwei Supraleiter miteinander in Kontakt, so ist zwischen ihnen ein Austausch von Ladungsträgern möglich. In einem Josephsonkontakt geschieht der Transport durch Tunneln von Cooperpaaren und Quasiteilchen. Dissipation spielt dann eine Rolle, wenn dem Tunnelkontakt ein ohmscher Widerstand R parallelgeschaltet ist. Dann folgt jedem Tunnelprozeß ein ausgleichender Ladungstransport über den Widerstand R , an dem eine makroskopisch große Zahl von Teilchen beteiligt ist. Sie stellen das Wärmebad dar. Ebenso führt eine Induktivität L , die eine Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld vermittelt, zu dissipativen Effekten. Diese Situation ist bei einem SQUID gegeben. Schließlich resultiert auch das inkohärente und somit stochastische Tunneln der Quasiteilchen in einem dissipativen Einfluß auf das Tunneln der Cooperpaare.

Mittels der Josephsongleichungen

$$\dot{\phi}(t) = \frac{e}{\hbar} V(t) \quad (9.9)$$

für die Spannung am Kontakt sowie

$$I = I_c \sin \phi \quad (9.10)$$

für den Josephson–Gleichstrom läßt sich die Dynamik der Phasendifferenz $\phi = \phi_1 - \phi_2$ der Phasen ϕ_i der beiden Supraleiter makroskopisch messen. Quanteneffekte werden dann sichtbar, wenn sich die diskrete Natur des mit einem Tunnelvorgang assoziierten Ladungstransports bemerkbar macht. Dazu muß die Kapazität des Tunnelkontaktes sehr klein sein. Man spricht dann von der Coulombblockade.

Ein Kandidat für die Untersuchung makroskopischer Auswirkungen der Quantenmechanik sind also kleine Josephson–Tunnelkontakte, denen ein ohmscher Widerstand R oder eine Induktivität L parallelgeschaltet ist.

Die Dynamik der Tunnelvorgänge ist durch die Josephsongleichungen (9.9,9.10) bestimmt. Mit ihrer Hilfe läßt sich ein Hamiltonian für den Josephson-Kontakt aufstellen, indem man alle Energiebeiträge aufsammelt und über die Phase ϕ und die Ladung Q ausdrückt. Letztere steht in Verbindung zur Ladungsdichte n . Anschließend berücksichtigt man, daß aufgrund des quantenmechanischen Hintergrunds der makroskopischen Wellenfunktion (9.8) die Quantisierung durch die Vertauschungsrelation

$$[\phi, Q] = ie \quad (9.11)$$

festgelegt ist. So erkennt man, daß der mit jedem Tunnelprozeß einhergehende Ladungstransport durch den Translationsoperator $\exp\{i\phi\}$ vermittelt wird. Der Tunnelterm

$$H_T = \sum_{\sigma, k_1, k_2} T_{k_1 k_2} c_{k_2 \sigma}^+ c_{k_1 \sigma} \exp\{i\phi\} + \text{h. c.} \quad (9.12)$$

vermittelt also die Umladung des Kontaktes um einen Ladungsträger sowie das Tunneln eines Quasiteilchens mit Quasiimpuls k_i und Spinprojektion σ . Der Tunnelhamiltonian läßt sich in seiner Wirkung auf das Tunneln von Cooperpaaren als effektiver Term

$$H_T = V_0 \cos\{i\phi\} \quad (9.13)$$

mit $V_0 = \frac{\hbar I_c}{2e}$ und dem kritischen Strom I_c in die Form eines periodischen Potentials bringen. Darauf werden wir unten nochmals eingehen.

Der BCS-Grundzustand lautet

$$\Phi = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+) \Phi_0 . \quad (9.14)$$

Φ_0 ist der Vakuumzustand. Mit den dadurch eingeführten Koeffizienten u_k und v_k findet man

$$V_0 = -4 \sum_{k, k'} |T_{k, k'}|^2 \frac{u_k v_k u_{k'} v_{k'}}{\epsilon_k + \epsilon_{k'}} \quad (9.15)$$

mit der Quasiteilchenenergie ϵ_k .

Die Energie des Josephsonkontaktes bei von außen fest vorgegebenem Strom I lautet

$$H_{\text{Sys}} = \frac{Q^2}{2C} + \frac{\hbar^2}{2e^2 L} \phi^2 - \frac{\hbar}{2e} I \phi \quad (9.16)$$

Hierbei ist eine Umdefinition der Josephsonphase ϕ vorgenommen worden. Der konjugierte Impuls Q beinhaltet nun die gesamte Ladung auf dem Tunnelkontakt und kann daher kontinuierliche Werte annehmen. Voraussetzung dafür ist die Anwesenheit eines ohmschen Widerstandes R . Aus diesem Grund ist die Verletzung der in der Invarianzbedingung $H(\phi + 2\pi) = H(\phi)$ durch die letzten beiden Terme des Hamiltonians erlaubt, die für die ursprüngliche Phase zu fordern ist. Der quadratische Term des Hamiltonians repräsentiert die magnetische Feldenergie.

Der eingeschlossene magnetische Fluß führt hier zu einer physikalischen Unterscheidbarkeit von Zuständen $\phi + 2n\pi$, die als Realisationen mit verschiedener Windungszahl aufgefaßt werden können.

Der so gewählte Hamiltonian beschreibt im Falle der Anwesenheit ohmscher dissipativer Effekte das Verhalten von $\dot{\phi}$ und somit der Spannung V richtig [29, 108] und liefert insbesondere die richtige Strom–Spannungs–Charakteristik $I(V)$. $\dot{\phi}$ steht dann in Beziehung zum gesamten Stromabfall über den Kontakt.

Der Einfluß der Dissipation läßt sich im Fall eines parallelgeschalteten ohmschen Widerstandes ausgehend von (9.2) über ein ohmsches Bad harmonischer Oszillatoren einbinden, wenn man das Spektrum an der Fermikante linearisiert [23, 24, 51]. Die Entwicklung der Exponentialfunktion ist dabei wegen der Begrenztheit der räumlichen Ausdehnung des Tunnelkontaktes möglich. Erst die erwähnte Umdefinition von ϕ führt dabei zu einer effektiven Wirkung vom Caldeira–Leggett–Typ.

Das Tunneln der Quasiteilchen führt dagegen auf ein etwas verändertes Influenzfunktional, in dem im wesentlichen der bilineare Charakter durch eine trigonometrische Form ersetzt ist [23, 24]. Dies erwächst aus dem Umstand, daß das Quasiteilchentunneln die Ladung nur diskret verändert. Da im Vergleich zum Cooperpaartunneln genau die Hälfte der Ladung transportiert wird, ist der zugehörige Term im Hamiltonian invariant unter Translationen um 4π . Der gesamte Beitrag des Tunnelhamiltonians (9.12) zur effektiven euklidischen Wirkung lautet

$$S_E^{(\text{j os, ohm})} = 4 \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \left\{ \alpha(\tau - \tau') \sin^2 \left(\frac{\phi(\tau) - \phi(\tau')}{4} \right) + \beta(\tau - \tau') \cos \left(\frac{\phi(\tau) + \phi(\tau')}{2} \right) \right\}.$$

Der zweite Term liefert gerade das effektive Cosinuspotential, während der erste für die Dissipation zuständig ist. $\alpha(t)$ läßt sich erneut über bosonische Greensche Funktionen ausdrücken und erhält dabei die Form (2.33).

Vernachlässigen wir die Induktivität des Kontaktes, so gelangen wir also zum Bild eines Teilchens in einem Cosinuspotential, das an ein Wärmebad gekoppelt ist. Die Phase ϕ entspricht der Ortskoordinate des Teilchens, während die Ladung Q mit seinem Impuls verknüpft ist. Das Teilchen hat die Masse

$$M = \left(\frac{\hbar}{2e} \right)^2 C, \quad (9.17)$$

bewegt sich in einem Potential der Stärke

$$V_0 = \frac{\hbar I_c}{2e} \quad (9.18)$$

und ist der Kraft

$$F = \frac{\hbar}{2e} I \quad (9.19)$$

ausgesetzt.

Das Wärmebad ist unter der angeführten linearen Näherung der Dispersionsrelation der Quasiteilchen an der Fermikante von strikt ohmscher Form und durch die Dämpfungskonstante

$$\eta = M\gamma \quad (9.20)$$

mit

$$\gamma = \frac{1}{RC} \quad (9.21)$$

charakterisiert. Der Kondoparameter wird durch

$$\alpha = \frac{R_0}{R} \quad (9.22)$$

mit $R_0 = h/4e^2$ bestimmt. Der Widerstand des Kontaktes ist mit der Mobilität über

$$\frac{U}{I} = \frac{\mu}{\mu_0} R \quad (9.23)$$

mit $\mu_0 = 1/\eta$ verknüpft. Insbesondere sollte die nichtlineare Mobilität den Einfluß der Coulombblockade verdeutlichen, da erst bei einer Schwellspannung von $V_c = e/2C$ Tunnelprozesse energetisch zugänglich werden. Dies ist experimentell wohl überprüft. Chen und Lebowitz [42] haben die nichtlineare Mobilität im Fall kleiner α berechnet. Ihr Ergebnis stimmt mit der erwarteten Form der Strom–Spannungs–Charakteristik gut überein. Insbesondere steigt der Strom bei der Schwellspannung stark an, der differentielle Widerstand wird also sehr klein, während er unterhalb der Schwellspannung sehr groß ist. Im Bereich jenseits des kritischen Stroms I_c dominiert der ohmsche Widerstand die Dynamik der Phase, so daß dort die Charakteristik in die klassisch vorgegebene Gerade mit Steigung $1/R$ übergeht.

Experimentell wurden der Einfluß von Dissipation auf das Tunneln in Josephsonkontakten [109] und das Flußtunneln in SQUIDs [109]–[112] untersucht. Dabei wurde eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen gefunden.

Kapitel 10

Zusammenfassung

Abschließend wollen wir die verschiedenen Ergebnisse kurz zusammenfassen und einordnen.

In den Kapiteln 2 und 3 sowie in Kapitel 5 haben wir die Grundlagen zur Diskussion des Transports eines diffusiven Teilchens in einem periodischen Gitter dargestellt. In Kapitel 2 gingen wir auf die grundlegenden Techniken ein und definierten Größen, die wir anschließend bei der Darlegung der Dynamik im Tight-Binding-Gitter und im Cosinuspotential verwendeten. Dabei stand die Behandlung des Caldeira-Leggett-Modells im Rahmen der quantenmechanischen und klassischen Antworttheorie sowie seine Quantisierung mittels der Pfadintegraltechnik im Vordergrund. Schließlich gelangten wir zur Influenzfunktionalbeschreibung der Propagation der reduzierten Dichtematrix. In Kapitel 3 leiteten wir die formal exakten Ausdrücke für die ersten beiden Momente der Dynamik im Tight-Binding-Potential her und diskutierten sie für große Zeiten. In Kapitel 5 leiteten wir die formal exakten Ausdrücke für das Teilchen im Cosinuspotential her.

Neue Ergebnisse haben wir in den Kapiteln 4, 6, 7 und 8 vorgestellt.

Der Inhalt des Kapitels 4 war die Berechnung des nichtlinearen ersten Momentes für große Zeiten im Tight-Binding-Gitter für subohmsche Dissipation. Wir zeigten, daß es mit dem linearen Moment übereinstimmt. Damit ist es für beliebig große Kräfte durch den Ausdruck (4.12) für das Brownsche Teilchen in Abwesenheit des Potentials gegeben.

In Kapitel 6 stellten wir die Dualitätstransformation vor und erweiterten sie zunächst durch formalen Vergleich der konvergenzerzeugenden Faktoren auf nicht-ohmsche spektrale Dichten. Anschließend diskutierten wir den Ausdruck (6.21) für die transformierte spektrale Dichte und erhielten die Abbildungen (6.25) und (6.42) für die charakteristischen Parameter der spektralen Dichte. Die Masse des Teilchens im Cosinuspotential ist durch (6.47) gegeben.

In Kapitel 7 beschäftigten wir uns mit der Anwendung der Dualitätstransformation. Dazu untersuchten wir die formal exakten Ausdrücke für das erste und das zweite Moment im Cosinuspotential. Wir konnten einige bekannte Ergebnisse wie die Gültigkeit der Einsteinrelation für $s \leq 1$ in einfacher Weise auf Resultate aus dem Tight-Binding-Gitter zurückführen und waren darüberhinaus in der Lage, auch im Parameterbereich $s > 1$ Ergebnisse zu erlangen. Diese waren bis dato unbekannt. Wir erhielten, daß sich das erste und das zweite Moment wie schon im Tight-Binding-Gitter im Bereich $1 < s < 2$ für große Zeiten linear in der Zeit verhalten und die Einsteinrelation erfüllt ist. Erst dadurch ist die Reduktion eines starken Potentials auf ein Tight-Binding-Gitter in diesem Parameterbereich gerechtfertigt. Daher sind diese Rechnungen als ein zentraler Punkt der Arbeit anzusehen. Die Ausdrücke für die Momente konnten wir direkt mit denen im Tight-Binding-Gitter verbinden. Damit ist nun das zeitliche Verhalten der ersten beiden Momente für große Zeiten und beliebige spektrale Dichten auch im Cosinuspotential bekannt.

Um die tieferliegende Struktur der Dualitätstransformation zu enthüllen, führten wir im 8. Kapitel eine direkte Abbildung des Tight-Binding-Modells auf das des Teilchens im Cosinuspotentials durch. Sie ist das wichtigste Ergebnis der vorliegenden Arbeit. Wir konnten den Tight-Binding-Hamiltonian (8.4) durch kanonische Transformationen in die Formen (8.37) und (8.43) überführen. Insbesondere waren wir dabei in der Lage, die vorher formal erhaltene Transformation (6.21) der spektralen Dichte in Anhang B zu reproduzieren (B.23). Auch die Beziehung (6.47) für die Masse des Teilchens im Cosinuspotential konnte in (8.13) wiedererlangt werden. Zusätzlich erhielten wir Beziehungen zwischen einigen Korrelationsfunktionen beider Modelle.

In Kapitel 9 skizzierten wir, unter welchen Voraussetzungen das in dieser Arbeit verwendete Caldeira-Leggett-Modell realistische Vorhersagen über den Transport von Teilchen in Metallen und die Strom-Spannungs-Charakteristik von Josephsonkontakten liefert.

Anhang A

Jacobische Determinante der Langevingleichung

Bei der Berechnung der propagierenden Funktion für faktorisierte Anfangsbedingungen im Cosinuspotential trat bei der Lösung des Pfadintegrals eine generalisierte Langevingleichung (5.13) auf. Um die Wege im Phasenraum mit deren Lösungen zu parameterisieren, also eine Koordinatentransformation im Funktionenraum durchzuführen, durch die das Pfadintegral lösbar wird, benötigen wir die Jacobische Determinante

$$D = \left(\frac{\partial f[x]}{\partial [x]} \right)^{-1}, \quad (\text{A.1})$$

die die Dichte der Lösungen im Phasenraum repräsentiert. Wir folgen Chen, Lebowitz und Liveriani [38] und berechnen D über die diskretisierte Fassung des Pfadintegrals

$$\begin{aligned} J_0(x_f, y_f, t; x_i, y_i, 0) &= \int \mathcal{D}x \delta^\infty(f[x]) g[x] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{m}{\epsilon} \right)^N \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{k=1}^{N-1} dx \prod_{k=1}^{N-1} \delta(\tilde{f}[x(t_k)]) g[x] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

bei äquidistantem Abstand ϵ der Stützstellen t_k . Hierbei ist

$$f[x(t_k)] = \frac{t_{k+1} - t_k}{\hbar} \left(-m\ddot{x}(t_k) + \tilde{\rho}(t_k) + \xi(t_k) - \eta(t_k)x_i - \int_0^{t_k} ds \eta(t_k - s)\dot{x}(s) \right) \quad (\text{A.3})$$

und

$$\begin{aligned} \tilde{f}[x(t_k)] &= -m \frac{x_k + 1 - 2x_k + x_{k-1}}{\epsilon} + \epsilon\tilde{\rho}_k + \epsilon\xi_k \\ &\quad - \epsilon\eta_k x_0 - \epsilon \sum_{l=1}^k \eta_{k-l} (x_l - x_{l-1}). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Der Index an den Größen steht mittels $h(t = k\epsilon) = h_k$ für das Zeitargument. Mit Kenntnis der Determinante

$$D_{N-1} = 2\pi\hbar \left(\frac{\epsilon}{m}\right)^N \left| \frac{\partial f[x_k]}{\partial x_k} \right| \quad (\text{A.5})$$

findet man die Lösung von (A.2) über

$$J_0(x_f, y_f, t; x_i, y_i, 0) = \frac{g[x]}{D[x]} \Big|_{f[x]=0}. \quad (\text{A.6})$$

Da D_{N-1} beinahe diagonal ist, läßt sich der Entwicklungssatz anwenden. Für die quadratischen Untermatrizen D_n mit n Spalten und Zeilen gelangt man so zur Rekursionsformel

$$\frac{D_{n+1} - 2D_n + D_{n-1}}{\epsilon^2} + \sum_{l=0}^{n-2} \frac{\eta_l}{m} (D_{n-l} - D_{n-l-1}) + D_1 \eta_{n-1} = 0. \quad (\text{A.7})$$

An dieser Stelle erkennt man, daß die Rauschkraft nicht mehr in die Bestimmung der Determinante eingeht. Gleiches gilt auch für den Beitrag $\tilde{\rho}(t)$ des Potentials. Sie sind nur zeitabhängig und fließen durch $g[x]$ in die Lösung ein. Die Gleichung (A.7) geht für $\epsilon \rightarrow 0$ in die Integrodifferentialgleichung

$$m\ddot{D}(\tau) + \int_0^\tau d\tau' \dot{D}(\tau - \tau') \eta(\tau') = 0 \quad (\text{A.8})$$

über. Sie ist unter den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} D(0) = D_1 = \frac{2\pi\hbar}{m}\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2) &\rightarrow 0; \\ \dot{D}(0) = \frac{D_2 - D_1}{\epsilon} &\rightarrow \frac{2\pi\hbar}{m} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

zu lösen, die aus der Definition (A.5) folgen.

Aus dem Fluß¹ der Langevingleichung

$$0 = -m\ddot{x}(t) + \tilde{\rho}(t) + \xi(t) - \eta(t)x_i - \int_0^t ds \eta(t-s)\dot{x}(s) \quad (\text{A.10})$$

läßt sich durch funktionales Ableiten nach \dot{x}_i die Differentialgleichung

$$0 = -m\ddot{E}(\tau) + \eta(\tau)E_i - \int_0^\tau ds \eta(\tau-s)\dot{E}(s) \quad (\text{A.11})$$

für

$$E(t) = \frac{\partial x[t; x_i, \dot{x}_i, t_i]}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial x(t)}{\partial \dot{x}_i} \quad (\text{A.12})$$

¹So bezeichnet man die Funktionale $x[t; x_i, \dot{x}_i, t_i]$.

herleiten. Auch in die Bestimmung von $E(t)$ gehen die Rauschkraft $\xi(t)$ und die Kraftstöße $\tilde{\rho}(t)$ nicht ein. Wegen $E_i = 0$ und $\dot{E}_i = 1$ ist die Differentialgleichung für $E(t)$ mit (A.10) identisch. (A.10) wird demnach unter den angegebenen Anfangsbedingungen durch

$$D(\tau) = \frac{2\pi\hbar}{m} E(\tau) = \frac{2\pi\hbar}{m} \frac{\partial x(\tau)}{\partial \dot{x}_i} \quad (\text{A.13})$$

gelöst. Schließlich erhalten wir so für die Determinante D den gesuchten Ausdruck

$$D = \frac{2\pi\hbar}{m} \frac{\partial x_f}{\partial \dot{x}_i}, \quad (\text{A.14})$$

mit dem wir in Kapitel 5 die Rechnung fortgesetzt haben.

Anhang B

Diagonalisierung des Bades

Bei der Herleitung der Dualitätstransformation über direkte Abbildungen der Hamiltonians haben wir festgestellt, daß das Bad diagonalisiert bzw. transformiert werden muß. Am offensichtlichsten wurde dies beim Übergang zum Lagrangeformalismus. Zunächst wurde dort das Bad diagonalisiert. Man gelangte so zum Lagrangian (8.12) mit der spektralen Dichte $\hat{J}(\omega)$ (8.14). Anschließend stellten wir fest, daß der Übergang zur Kopplung an das Bad über die Ortskoordinate eine weitere Modifizierung der spektralen Dichte ergibt. Diese Dichte bezeichneten wir mit $J_{\text{wc}}(\omega)$. Ihre Bestimmung ist Ziel dieses Anhanges.

Um die Badoszillatoren beim Übergang von (8.10) nach (8.12) zu entkoppeln, müssen wir die Matrix

$$A_{ij} = \delta_{ij}m_i(\omega_i^2 - \omega^2) - \frac{C_i C_j}{\eta(0)} \quad (\text{B.1})$$

diagonalisieren, wobei die neuen Eigenfrequenzen Ω_i durch die Nullstellen der Determinante von \underline{A} bezüglich der Frequenz ω gegeben sind. Anschließend sind die transformierten Massen und Kopplungsstärken der neuen Eigenmoden y_i zu bestimmen. Aus ihnen erhält man nach Gl. (8.14) die neue spektrale Dichte $\hat{J}(\omega)$ in Geschwindigkeitskopplung. Damit ist auch $J_{\text{wc}}(\omega) = \omega^2 \hat{J}(\omega)$ gegeben.

Um die neuen Parameter zu erhalten, zerlegen wir zunächst \underline{A} in die zwei Teile

$$\underline{A} = \underline{B} - \underline{C}; \quad (\text{B.2})$$

$$B_{ij} = \delta_{ij}m_i(\omega_i^2 - \omega^2); \quad (\text{B.3})$$

$$C_{ij} = \frac{C_i C_j}{\eta(0)}. \quad (\text{B.4})$$

Im Anschluß an die Transformation lautet sie dann

$$\tilde{A}_{ij} = \delta_{ij}M_i(\Omega_i^2 - \omega^2). \quad (\text{B.5})$$

Die Matrix der Kopplungskonstanten nimmt die Form

$$C_{ij} = D_i D_j \frac{\eta(0)}{\eta^2} \quad (\text{B.6})$$

an, wobei wir die neuen Kopplungskonstanten D_i in geeigneter Art und Weise normiert haben, so daß sich nach der Diagonalisierung der Lagrangian (8.12) ergibt.

Zunächst stellen wir fest, daß die Matrix \underline{A} einen Eigenwert $\Omega_0 = 0$ besitzt. Der zugehörige Eigenvektor \mathbf{y}^0 hat die dimensionslosen Komponenten

$$\mathbf{y}_j^0 = \frac{C_j}{m_j \omega_j^2}. \quad (\text{B.7})$$

Das Verhältnis zwischen seiner Masse und seiner quadrierten Kopplungsstärke ist

$$\begin{aligned} \frac{M_0}{D_0^2} &= \sum_{j=1}^N \frac{C_j^2}{m_j \omega_j^4} \left(\frac{\eta^2}{\eta^2(0)} \left(\sum_{j=1}^N \frac{C_j^2}{m_j \omega_j^2} \right)^2 \right)^{-1} \\ &= \frac{2}{\pi \eta^2} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{\text{tb}}(\omega)}{\omega^3}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Diese Mode des Bades wollen wir 0-Mode nennen.

In der Regel wird man die Matrix \underline{A} dadurch diagonalisieren wollen, daß man zu massenreduzierten Koordinaten übergeht und das entstehende Eigenwertproblem betrachtet. Wir sind aber nur an der Transformation der spektralen Dichte interessiert. Um diese durchzuführen, betrachten wir die Invarianten der Matrix $\underline{A}(\omega)$ und setzen sie mit der Größe $\tilde{K}(\omega)$ aus (2.16), gebildet mit den spektralen Dichte $J_{\text{tb}}(\omega)$ sowie $\hat{J}(\omega)$, in Verbindung.

Die Invarianten erhält man als Vorfaktoren des charakteristischen Polynoms

$$\text{Det}(A_{ij}(\omega) - \delta_{ij} \lambda) = \sum_{i=1}^N \lambda^i I_i^A. \quad (\text{B.9})$$

Insbesondere ist I_0^A gerade die Determinante von $\underline{A}(\omega)$. Die Matrix $\underline{A}(\omega)$ hat eine relativ einfache Form. Sie ist die Summe einer Diagonalmatrix und einem dyadischen Produkt zweier Vektoren. Immer dann, wenn mehr als ein Faktor der Determinante vom dyadischen Produkt stammt, gibt es einen anderen Term, der diesen genau weghebt. Man erhält nach kurzer Rechnung

$$\begin{aligned} I_0^A(\omega) &= -M_0 \omega^2 \prod_{i=1}^{N-1} \tilde{m}_i (\Omega_i^2 - \omega^2) \\ &= \prod_{i=1}^N m_i (\omega_i^2 - \omega^2) - \sum_{l=1}^N \frac{C_l^2}{\eta(0)} \prod_{i=1}^{N'} m_i (\omega_i^2 - \omega^2) \\ &= I_0^B(\omega) - \sum_{l=1}^N \frac{C_l^2}{\eta(0)} \prod_{i=1}^{N'} m_i (\omega_i^2 - \omega^2). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Der Strich am Produktsymbol weist darauf hin, daß der Faktor $i = l$ ausgespart bleibt. Löst man andererseits nach $\underline{B} = \underline{A} + \underline{C}$ auf, so erhält man in analoger Weise

$$I_0^B(\omega) = I_0^A(\omega) + \sum_{l=0}^{N-1} \frac{D_l^2 \eta(0)}{\eta^2} \prod_{i=0}^{N-1'} M_i(\Omega_i^2 - \omega^2). \quad (\text{B.11})$$

Insbesondere ist

$$\frac{I_0^B(\omega) - I_0^A(\omega)}{I_0^A(\omega)} = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{D_l^2}{M_l(\Omega_l^2 - \omega^2)} \frac{\eta(0)}{\eta^2} \quad (\text{B.12})$$

und andererseits

$$\frac{I_0^B(\omega) - I_0^A(\omega)}{I_0^B(\omega)} = \sum_{l=1}^N \frac{C_l^2}{m_l(\omega_l^2 - \omega^2)} \frac{1}{\eta(0)}. \quad (\text{B.13})$$

Die in (2.16) definierte Größe $\tilde{K}_J(\omega)$, deren Index auf die verwendete spektrale Dichte hinweist, lautet in diskreter Darstellung

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega) &= \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{m_i \omega_i^2} \frac{\omega^2}{\omega_i^2 - \omega^2} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{m_i \omega_i^2} \left(\frac{\omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega^2} - 1 \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{m_i} \left(\frac{1}{\omega_i^2 - \omega^2} \right) - \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{m_i \omega_i^2} \\ &= \eta(0) \frac{I_0^B(\omega) - I_0^A(\omega)}{I_0^B(\omega)} - \eta(0) \frac{I_0^B(0) - I_0^A(0)}{I_0^B(0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Weiter umgeformt ergibt dies

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega) &= -\eta(0) \frac{I_0^A(\omega)}{I_0^B(\omega)} + \eta(0) \frac{I_0^A(0)}{I_0^B(0)} \\ &= -\eta(0) \frac{I_0^A(\omega)}{I_0^B(\omega)} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

mit $I_0^A(0) = 0$ wegen des verschwindenden Eigenwertes ω_0 der 0-Mode.

Für die transformierte spektrale Dichte $\hat{J}(\omega)$ gelangt man über

$$\begin{aligned} \tilde{K}_J(\omega) &= \sum_{i=1}^N \frac{D_i^2}{M_i \tilde{\omega}_i^2} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{D_i^2}{m_i} \left(\frac{1}{\omega_i^2 - \omega^2} \right) - \sum_{i=1}^N \frac{D_i^2}{m_i \omega_i^2} \frac{\omega^2}{\Omega_i^2 - \omega^2} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

zu

$$\begin{aligned}
\tilde{K}_j(\omega) &= \frac{\eta^2}{\eta(0)} \left(\frac{I_0^B(\omega) - I_0^A(\omega)}{I_0^A(\omega)} - \frac{I_0^B(0) - I_0^A(0)}{I_0^A(0)} \right) \\
&= \frac{\eta^2}{\eta(0)} \left(\frac{I_0^B(\omega)}{I_0^A(\omega)} - \frac{I_0^B(0)}{I_0^A(0)} \right) \\
&= -\eta^2 \frac{1}{\tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega)} - \frac{\eta^2}{\eta(0)} \frac{I_0^B(0)}{I_0^A(0)}. \tag{B.17}
\end{aligned}$$

Der letzte Term ist divergent. Wie wir sehen werden, erhalten wir ihn auch auf der linken Seite.

An dieser Stelle kann nun $\hat{J}(\omega)$ durch $J_{\text{wc}}(\omega)/\omega^2$ ersetzt werden. Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\tilde{K}_j(\omega) &= \frac{2}{\pi} \omega^2 \int_0^\infty d\omega' \frac{\hat{J}(\omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} \\
&= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{wc}}(\omega')}{\omega'^2} \frac{\omega^2 - \omega'^2 + \omega'^2}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} \\
&= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{wc}}(\omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{wc}}(\omega')}{\omega'^3} \\
&= \frac{\tilde{K}_{J_{\text{wc}}}(\omega)}{\omega^2} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{wc}}(\omega')}{\omega'^3}. \tag{B.18}
\end{aligned}$$

Diese Beziehung kann auch anhand von (B.16) mit $E_i = \Omega_i D_i$ in diskretisierter Fassung eingesehen werden.

Andererseits folgt aus (B.12)

$$\begin{aligned}
\frac{\eta^2}{\eta(0)} \frac{I_0^B(0)}{I_0^A(0)} &= \frac{\eta^2}{\eta(0)} + \sum_{l=0}^{N-1} \frac{E_l^2}{M_l \Omega_l^4} \\
&= \frac{\eta^2}{\eta(0)} + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{wc}}(\omega')}{\omega'^3}. \tag{B.19}
\end{aligned}$$

Mit (B.17) erhalten wir also

$$\frac{\tilde{K}_{J_{\text{wc}}}(\omega)}{\omega^2} = -\eta^2 \frac{1}{\tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega)} - \frac{\eta^2}{\eta(0)} \tag{B.20}$$

Dies ist für eine Masse $M = \eta^2/\eta(0)$ im Cosinuspotential und $m = 0$ im Tight-Binding-Gitter genau mit (6.34) identisch. Tatsächlich erhält man mit

$$\text{Im} \tilde{K}_J(\omega) = J(\omega) \tag{B.21}$$

das Ergebnis

$$J_{\text{wc}}(\omega) = \eta^2 \frac{\omega^2 J_{\text{tb}}(\omega)}{|\tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega)|^2} = \eta^2 \frac{J_{\text{tb}}(\omega)}{|\eta_{J_{\text{tb}}}(\omega)|^2}. \tag{B.22}$$

Aufgelöst nach $\tilde{K}_{J_{\text{tb}}}(\omega)$ folgt

$$J_{\text{tb}}(\omega) = \eta^2 \frac{\omega^2 J_{\text{wc}}(\omega)}{|M\omega^2 + \tilde{K}_{J_{\text{wc}}}(\omega)|^2}. \quad (\text{B.23})$$

Auch $\hat{J}(\omega)$ ist durch (B.17) festgelegt. Dabei gilt für $\omega \neq 0$ natürlich die definierende Beziehung (8.23). Bei $\omega = 0$ trägt die 0-Mode bei. Sie spielt beider Kopplung über den Ort keine Rolle. Setzt man ihre Parameter in die spektrale Dichte ein, so liefert sie den Beitrag

$$J_0(\omega) = \frac{\pi^2 \eta^2}{4} \left(\int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{tb}}(\omega')}{\omega'^3} \right)^{-1} \frac{1}{\omega} \delta(\omega). \quad (\text{B.24})$$

Um das Produkt der divergenten Masse mit der verschwindenden Frequenz im Nenner richtig zu behandeln, betrachten wir

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} i\omega K_2^{(\text{tb})}(\omega) = - \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{2i}{\pi} \omega \int_0^\infty d\omega' \frac{J_{\text{tb}}(\omega')}{\omega'^3}. \quad (\text{B.25})$$

Aus der Transformation (B.22) der spektralen Dichte folgt

$$\eta^2 = \lim_{\omega \rightarrow 0} \eta_{\text{tb}}(\omega) \eta_{\text{wc}}(\omega), \quad (\text{B.26})$$

so daß wir zu

$$J_0(\omega) = \frac{\pi}{2i} \eta_{\text{wc}}(|\omega|) \delta(\omega) \quad (\text{B.27})$$

gelangen. $\eta_{\text{wc}}(|\omega|)$ ist im allgemeinen eine ungerade Funktion, die aber für $\tilde{s} < 1$ bei 0 divergiert. Damit lautet die korrigierte Fassung

$$\hat{J}(\omega) = \frac{\pi}{2i} \eta_{\text{wc}}(|\omega|) \delta(\omega) + \frac{J_{\text{wc}}(\omega)}{\omega^2}. \quad (\text{B.28})$$

Literaturverzeichnis

- [1] R. P. Feynman, F. L. Vernon, Ann. Phys. (N. Y.) **24**, 118 (1963)
- [2] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Ann. Phys. (N. Y.) **149**, 374 (1983)
Err.: A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Ann. Phys. (N. Y.) **153**, 445(E) (1983)
- [3] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Physica **121 A**, 587 (1983)
Err.: A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Physica **130 A**, 374(E) (1985)
- [4] U. Weiss, W. Häffner, Phys. Rev. D **27**, 2916 (1983)
- [5] H. Grabert, U. Weiss, Phys. Rev. Lett. **53**, 1787 (1984)
- [6] H. Grabert, P. Olschowski, U. Weiss, Phys. Rev. B **36**, 1931 (1987)
- [7] P. Hänggi, P. Talkner, M. Borkovec, Rev. Mod. Phys. **62**, 251 (1990)
- [8] H. Grabert, U. Weiss, P. Talkner, Z. Physik B **55**, 87 (1984)
- [9] P. S. Riseborough, P. Hänggi, U. Weiss, Phys. Rev. A **31**, 471 (1985)
- [10] F. Haake, R. Reibold, Phys. Rev. A **32**, 2462 (1985)
- [11] C. M. Smith, A. O. Caldeira, Phys. Rev. A **41**, 3103 (1990)
- [12] S. Chakravarty, A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **52**, 5 (1984)
- [13] S. Chakravarty, S. Kivelson, Phys. Rev. B **32**, 76 (1985)
- [14] H. Grabert, U. Weiss, Phys. Rev. Lett. **54**, 1605 (1985)
- [15] M. P. A. Fisher, A. T. Dorsey, Phys. Rev. Lett. **54**, 1609 (1985)
- [16] A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, M. Wartak, Phys. Rev. A **33**, 1117 (1986)
- [17] U. Weiss, H. Grabert, S. Linkwitz, J. Low Temp. Phys. **68**, 213 (1987)
- [18] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987)
- [19] U. Weiss, H. Grabert, P. Hänggi, P. Riseborough, Phys. Rev. B **35**, 9535 (1987)

- [20] U. Weiss, M. Wollensak, Phys. Rev. Letters **62**, 1663 (1989)
- [21] R. Görlich, M. Sassetti, U. Weiss, Europhys. Lett. **10**, 507 (1989)
- [22] M. Sassetti, U. Weiss, Phys. Rev. A **41**, 5383 (1990)
- [23] V. Ambegaokar, U. Eckern, G. Schön, Phys. Rev. Lett. **48**, 1745 (1982)
- [24] U. Eckern, G. Schön, V. Ambegaokar, Phys. Rev. B **30**, 6419 (1984)
- [25] S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **49**, 681 (1982)
- [26] W. Zwerger, Phys. Rev. B **35**, 4737 (1987)
- [27] U. Weiss, M. Wollensak, Physica B **152**, 154 (1988)
- [28] A. D. Zaikin, J. Low Temp. Phys. **80**, 223 (1990)
- [29] G. Schön, A. D. Zaikin, Phys. Reports **198**, 237 (1990)
- [30] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1993)
- [31] U. Weiss, H. Grabert, Phys. Lett. **108A**, 63 (1985)
- [32] A. D. Zaikin, S. V. Panyukov, Sov. Phys. JETP **64**, 991 (1987)
- [33] A. D. Zaikin, S. V. Panyukov, Sov. Phys. JETP **66**, 517 (1987)
- [34] A. D. Zaikin, S. V. Panyukov, Phys. Lett. A **120**, 306 (1987)
- [35] U. Weiss, M. Wollensak, Phys. Rev. B **37**, 2729 (1988)
- [36] M. Sassetti, P. Saracco, E. Galleani d'Agliano, F. Napoli, Zeitschrift für Phys. B **77**, 491 (1989)
- [37] U. Eckern, F. Pelzer, Europhys. Lett. **3**, 131 (1987)
- [38] Y.-C. Chen, J. L. Lebowitz, C. Liverani, Phys. Rev. B **40**, 4664 (1989)
- [39] U. Weiss, M. Sassetti, Th. Negele, M. Wollensak, Z. Physik B **84**, 471 (1991)
- [40] Y.-C. Chen, J. Stat. Phys. **65**, 761 (1991)
- [41] Y.-C. Chen, J. L. Lebowitz, Phys. Rev. B **46**, 10743 (1992)
- [42] Y.-C. Chen, J. L. Lebowitz, Phys. Rev. B **46**, 10751 (1992)
- [43] M. Sassetti, M. Milch, U. Weiss, Phys. Rev. A **46**, 4615 (1992)
- [44] V. Hakim, A. Muramatsu, F. Guinea, Phys. Rev. B **30**, 464 (1984)
- [45] F. Guinea, V. Hakim, A. Muramatsu, Phys. Rev. B **32**, 4410 (1985)
- [46] F. Guinea, V. Hakim, A. Muramatsu, Phys. Rev. Lett. **54**, 263 (1985)

- [47] P. Hedegård, A. O. Caldeira, Phys. Rev. B **35**, 106 (1987)
- [48] P. Hedegård, A. O. Caldeira, Phys. Scr. **35**, 609 (1987)
- [49] G. T. Zimányi, K. Vladár, A. Zawadowski, Phys. Rev. B **36**, 3186 (1987)
- [50] F. Sols, F. Guinea, Phys. Rev. B **36**, 7775 (1987)
- [51] G. Schön, A. D. Zaikin, Phys. Rev. B **40**, 5231 (1989)
- [52] M. Sassetti, E. Galleani d'Agliano, F. Napoli, Physica B **154**, 359 (1989)
- [53] L. Bönig, K. Schönhammer, W. Zwerger, Phys. Rev. B **46**, 855 (1992)
- [54] D. Waxman, J. Phys. A **23**, 1137 (1990)
- [55] F. Haake, in *Quantum Statistics in Optics and Solid State Physics*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 66, ed. by G. Höhler (Springer, Berlin, 1973)
- [56] M. S. Green, J. Chem. Phys. **20**, 1281 (1952)
- [57] R. Kubo, Rep. Progr. Phys. (London) **29**, 255 (1966)
- [58] D. N. Zubarev, Fort. Phys. **9**, 275 (1961)
- [59] L. P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Addison–Wesley, New York, 1989)
- [60] S. Doniach, E. H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physicists* (Benjamin, Reading, Ma., 1974)
- [61] E. N. Economou, *Green's Function in Quantum Physics* (Springer, Berlin, 1990)
- [62] W. Nolting, *Grundkurs: Theoretische Physik, 7. Viel-Teilchen-Theorie* (Zimmermann–Neufang, 1991)
- [63] E. Fick, G. Sauermaun, *The Quantum Statistics of Dynamic Processes*, Springer Series in Solid–State Sciences, Vol. 88, ed. by M. Cardona et al. (Springer Verlag, Berlin, 1990)
- [64] A. Schmid, Phys. Rev. Lett. **51**, 1506 (1983)
- [65] M. P. A. Fisher, W. Zwerger, Phys. Rev. B **32**, 6190 (1985)
- [66] R. J. Rubin, J. Math. Phys. **1**, 309 (1960)
- [67] R. J. Rubin, J. Math. Phys. **2**, 373 (1961)
- [68] I. R. Senitzky, Phys. Rev. **119**, 670 (1960)
- [69] G. W. Ford, M. Kac, P. Mazur, J. Math. Phys. **6**, 504 (1965)
- [70] P. Ullersma, Physica (Utrecht) **32**, 27, 56, 74, 90 (1966)

- [71] R. Zwanzig, *J. Stat. Phys.* **9**, 215 (1973)
- [72] A. Schmid, *J. Low Temp. Phys.* **49**, 609 (1982)
- [73] C. W. Gardiner, *Quantum Noise* (Springer, Berlin, 1991)
- [74] H. B. Callen, T. A. Welton, *Phys. Rev.* **83**, 34 (1951)
- [75] H. Mori, *Progr. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965)
- [76] R. Benguria, M. Kac, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1 (1981)
- [77] G. W. Ford, M. Kac, *J. Stat. Phys.* **46**, 803 (1987)
- [78] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)
- [79] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Mc Graw–Hill, New York, 1965)
- [80] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981)
- [81] B. Felsager, *Geometry, Particles and Fields* (Odense University Press, 1981)
- [82] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, (World Scientific, Singapore, 1990)
- [83] G. Roepstorff, *Pfadintegrale in der Quantenphysik* (Vieweg, Braunschweig, 1991)
- [84] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons* (North Holland, 1985)
- [85] S. Coleman, in: *The Whys of Subnuclear Physics*, Proceedings of the International School of Subnuclear Physics, Erice, 1977, ed. by A. Zichichi, S. 805 (Plenum, New York, 1979)
- [86] H. Grabert, P. Schramm, G.-L. Ingold, *Phys. Rep.* **168**, 115 (1988)
- [87] L. V. Keldysh, *Z. Eksp. Theor. Fiz.* **47**, 1515 (1964)
L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20**, 1018 (1965) in engl.
- [88] Th. Negele, Dissertation (Universität Stuttgart, 1993)
- [89] C. Aslangul, N. Pottier, D. Saint-James *J. Phys. (Paris)* **48**, 1093 (1987)
- [90] A. J. Bray, M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1546 (1982)
- [91] J. M. Martinis, H. Grabert, *Phys. Rev. B* **38**, 2371 (1988)
- [92] J. Allinger, Diplomarbeit (Universität Stuttgart, 1990)
- [93] R. A. Marcus, N. Sutin, *Biochim. Biophys. Acta* **811**, 265 (1985)

- [94] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1971)
- [95] J. Kondo, *Physica* **125** B, 279 (1984)
- [96] J. Kondo, *Physica* **126** B, 377 (1984)
- [97] J. Kondo, *Physica* **141** B, 305 (1986)
- [98] H. Grabert, L. Linkwitz, S. Dattagupta, U. Weiss, *Europhys. Lett.* **2**, 631 (1986)
- [99] F. Napoli, unpublished
- [100] G. M. Luke et al., *Phys. Rev. B* **43**, 3284 (1991)
- [101] O. Hartmann et al., *Hyperfine Interactions* **64**, 641 (1990)
- [102] I. S. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1439 (1990)
- [103] B. Golding, N. M. Zimmermann, S. N. Coppersmith, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 998 (1992)
- [104] H. Wipf, D. Steinbinder, K. Neumaier, P. Gutsmedl, A. Magerl, A. J. Dianoux, *Europhys. Lett.* **4**, 1379 (1989)
- [105] D. Steinbinder, H. Wipf, A. Magerl, A. D. Dianoux, K. Neumaier, *Europhys. Lett.* **6**, 535 (1988)
- [106] H. Grabert, H. Wipf, in: *Festkörperprobleme/Advances in Solid State Physics*, Vol. 30, ed. by U. Rössler, S. 1 (Vieweg, Braunschweig, 1990)
- [107] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Addison–Wesley, New York, 1989)
- [108] W. Zwerger, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **34**, 6518 (1986)
- [109] A. N. Cleland, J. M. Martinis, J. Clarke, *Phys. Rev. B* **37**, 5950 (1988)
- [110] A. N. Cleland, J. M. Martinis, J. Clarke, *Phys. Rev. B* **36**, 58 (1987)
- [111] S. Washburn, R. A. Webb, R. F. Voss, S. M. Faris, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2712 (1985)
- [112] D. B. Schwartz, B. Sen, C. N. Archie, J. E. Lukens, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1547 (1985)

Danksagung

An dieser Stelle möchte einigen Personen meinen Dank aussprechen, die mich auf unterschiedlichste Art und Weise bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben.

- Prof. U. Weiss stellte mir ein sehr interessantes Thema und ließ mir große Freiheiten bei der Bearbeitung desselben.
- Prof. M. Wagner übernahm den Mitbericht.
- Prof. W. Weidlich nahm mich an das II. Institut für Theoretische Physik auf.
- Jürgen Stockburger, Thomas Heck und Peter Molnar sorgten für einen reibungslosen Rechnerbetrieb, Anja Mohr leitete ebenso gekonnt das Sekretariat.
- Von Dr. Thomas Negele und Dr. Manfred Milch lernte ich viel während der Einarbeitungsphase.
- Die beiden vorgenannten bildeten mit Jürgen Allinger, Jürgen Stockburger, Andy Streit, Harald Weber–Gottschick, Susanne Yelin, Dietmar Weinmann, Reihold Egger, Walter Pfaff, Stephan Wittmer und Daniel Braun eine lebendige und angenehme Arbeitsgruppe. Von den unzähligen physikalischen Diskussionen profitierte ich sehr. Timm Sigg, Andy Streit, Jürgen Allinger, Harald Weber–Gottschick, Thomas Negele und Stephan Wittmer sorgten für eine sinnvolle Ausfüllung der Mittagspausen. Timm Sigg et. al. ermöglichten den so wichtigen sportlichen Ausgleich.
- Andy Streit und Harald Weber–Gottschick erleichterten mir die Erstellung der Abbildungen und überließen mir auch des öfteren den Kopka.