

Anwendung von Funktionalintegralen auf
Transport- und Relaxationsphänomene
in dissipativen Quantensystemen

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr.rer.nat.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Gert-Ludwig Ingold
aus Stuttgart

Hauptberichter: Prof.Dr.rer.nat. H. Grabert
Mitberichter: Prof.Dr.rer.nat. H.-R. Trebin
Tag der mündlichen Prüfung: 17. Oktober 1988

Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart
1988

INHALTSVERZEICHNIS

Kurzfassung	4
Symbolverzeichnis	5
1. Einleitung und Übersicht	11
2. Funktionalintegrale und dissipative Quantensysteme	16
2.1. Der quantenmechanische Propagator in Funktionalintegraldarstellung	16
2.2. Die kanonische Dichtematrix als Imaginärzeitfunktionalintegral	20
2.3. Modell für dissipative Systeme	22
2.4. Präparation von Anfangszuständen	30
2.5. Die reduzierte Dynamik	32
3. Zerfall metastabiler Zustände	41
3.1. Thermisches Hüpfen und quantenmechanisches Tunneln	41
3.2. Bestimmung der crossover-Temperatur	44
3.3. Berechnung der Zerfallsrate	47
3.4. Einfluß von Gedächtniseffekten auf die Zerfallsrate	52
4. Globale Phasenkohärenz in granularen Supraleitern	56
4.1. Das Experiment	56
4.2. Das Modell	58
4.3. Variationsrechnung	65
4.4. Das Phasendiagramm bei $T=0$	71
4.5. Das Phasendiagramm bei endlichen Temperaturen	77
4.6. Der Einfluß von Unordnung	81
4.7. Weitere Überlegungen zum Phasendiagramm und Ausblick	82

5.	Quantenmechanische Brownsche Bewegung	85
5.1.	Der gedämpfte harmonische Oszillator	85
5.2.	Die Korrelationsfunktionen des freien Brownschen Teilchens	89
5.3.	Die Korrelationsfunktionen für ohmsche Dämpfung	92
5.4.	Langzeitverhalten der Korrelationen bei frequenzabhängiger Dämpfung	95
5.5.	Die propagierende Funktion	101
5.6.	Dynamik eines anfänglich lokalisierten Zustandes	107
6.	Transport über eine parabolische Barriere	111
6.1.	Kramers-Theorie	111
6.2.	Vom harmonischen Oszillator zur parabolischen Barriere	114
6.3.	Konstruktion der Flußlösung	118
6.4.	Berechnung der Zerfallsrate	125
6.5.	Der Übergang zu tieferen Temperaturen	128
7.	Zusammenfassung und Ausblick	131
	Literaturverzeichnis	133

KURZFASSUNG

INGOLD, GERT-LUDWIG:

Anwendung von Funktionalintegralen auf Transport- und Relaxationsphänomene in dissipativen Quantensystemen

Funktionalintegrale erfreuen sich in letzter Zeit großer Beliebtheit bei der Untersuchung dissipativer Quantensysteme, da es mit ihrer Hilfe möglich ist, auch den Bereich tiefer Temperaturen und starker Dämpfung zu erfassen. Nach der Elimination des Wärmebades, das für die Dissipation verantwortlich ist, erfolgt eine effektive Beschreibung des relevanten Freiheitsgrades mittels des Influenzfunktionalis.

In dieser Arbeit werden Anwendungen der Funktionalintegralmethode sowohl in Imaginärzeit als auch in Realzeit dargestellt.

Zunächst wird das Imaginärzeitfunktionalintegral dazu benutzt, die Zerfallsrate eines metastabilen Zustands für Temperaturen zu berechnen, bei denen das thermische Hüpfen dominiert. Es werden die Quantenkorrekturen zum klassischen Arrhenius-Gesetz bestimmt und besonders die Rolle von frequenzabhängiger Dämpfung diskutiert.

Anschließend werden aus Josephsonkontakten bestehende Netzwerke mit der Imaginärzeitmethode untersucht. Eine Variationsrechnung zeigt, daß Dissipation für den Phasenübergang zwischen lokaler und globaler Supraleitung verantwortlich sein kann. Dies ist für die Interpretation von Experimenten an granularen Supraleitern von Interesse.

Die Beschreibung der Dynamik eines freien Brownschen Teilchens und eines Teilchens an einer parabolischen Barriere erfordert den Einsatz von Realzeitmethoden. Dabei wird die Verwendung faktorisierten Anfangszustände vermieden, um anfängliche Korrelationen zwischen System und Wärmebad zu berücksichtigen.

Das freie Brownsche Teilchen zeigt in Abhängigkeit vom angekoppelten Wärmebad eine Vielfalt verschiedener Verhaltensweisen. Beispielsweise findet man anomale Diffusion, und unter bestimmten Bedingungen kann ein anfänglich lokalisierter Zustand für alle Zeiten lokalisiert bleiben.

Zum Transport über eine parabolische Barriere wird eine quantenmechanische Theorie vorgestellt, die sich als Verallgemeinerung der klassischen Kramers-Theorie verstehen läßt. Damit kann man, im Rahmen des Gültigkeitsbereichs dieser Theorie, das Resultat für die Zerfallsrate aus der Imaginärzeitrechnung bestätigen.

SYMBOLVERZEICHNIS

Soweit angebracht, wird bei den Symbolen die Gleichung angegeben, in der die betreffende Größe eingeführt wird. Falls Symbole mehrfach verwendet werden, so ist ihre Bedeutung aus dem Zusammenhang zu ersehen. Wenn nichts anderes erklärt ist gelten folgende Bezeichnungen:

zeitliche Ableitungen	\dot{f}, \ddot{f}, \dots
konjugiert komplexe Größe	f^*
Laplace-Transformierte	\hat{f}
Realteil	f'
Ortsableitungen	f', f'', \dots
Fouriertransformierte	\tilde{f}

$A(t)$	antisymmetrische Orts-Orts-Korrelation (5.8)
a	Gitterkonstante (4.18)
a	Abkürzung in der Kramers-Variablen (6.4), (6.39)
a_n	Entwicklungskoeffizienten (3.20)
C	Kapazität (4.3)
C_{ij}	Kapazität zwischen i und j im RSJ-Netzwerk (4.13)
c_n	Kopplungskonstante des Systems an den n -ten Badoszillator (2.23)
D	Variationsparameter (4.16)
D	Diffusionskonstante (5.25)
D_s	verallgemeinerte Diffusionskonstante (5.44)
D^*	kritischer Wert von D bei $\alpha=0$ (4.40)
d	Dimension des Netzwerks (4.18)
E_0	Ladungsenergie (4.5)
e	Elementarladung
e	Basis des natürlichen Logarithmus
F	freie Energie (3.22), (4.15)
F'	Abschätzung für die freie Energie (4.15)
F_0	freie Energie für Variationsansatz (4.15)
$F(s)$	äußere Kraft
$\tilde{F}[q, q', \bar{q}]$	Influenzfunktional (2.50)
f_Q	Quantenkorrekturfaktor (3.24)
$f(\pm\infty)$	asymptotische Werte der Präparationsfunktion (6.32)
$G(q_f, q_i, t)$	Propagator (2.3)

$G(q_f, x_{n_f}, t; q_i, x_{n_i}, 0)$	Propagator (2.44)
$G_1(x_f, r_f, t)$	Korrekturfunktion (6.17)
$G_2(x_i, r_i, t, x_f)$	Korrekturfunktion (6.19)
$G_3(r_i, t, x_f)$	Abkürzung (6.29)
H	Hamiltonoperator
\hbar	Plancksches Wirkungsquantum dividiert durch 2π
I_c	kritischer Strom eines Josephsonkontakts (4.1)
I_j	Josephsonstrom (4.1)
I_q	Quasiteilchenstrom (4.2)
I_v	Verschiebungsstrom (4.3)
$I(\omega)$	spektrale Dichte der Badoszillatoren (2.25)
J	Kopplung im XY-Modell (4.61)
J_F	Fluß der Fluß-Lösung (6.51)
J_0	normierter Fluß (6.53)
$J(q_f, q'_f, t, q_i, q'_i, \bar{q}, \bar{q}')$	propagierende Funktion (2.49)
$K(\theta)$	Integralkern im Influenzfunktional (2.54)
\vec{k}	Wellenvektor (4.17)
k_B	Boltzmannkonstante
k_0	Radius der Brillouinzone (4.29)
$k(\tau)$	Integralkern (2.57)
L	linearer Operator (3.5)
\mathcal{L}	Lagrangefunktion
\mathcal{L}_B	Lagrangefunktion des Bades (2.22)
\mathcal{L}^E	euklidische Lagrangefunktion
\mathcal{L}_S	Lagrangefunktion des Systems (2.21)
\mathcal{L}_{SB}	Lagrangefunktion der System-Bad-Kopplung (2.23)
M	Masse des Brownschen Teilchens (2.19)
M_r	renormierte Masse (5.31)
m_n	Masse des n-ten Badoszillators (2.22)
N	Zahl der Inseln im Netzwerk
O_j, O'_j	Störoperatoren im Hilbertraum des Systems (2.39)
O	Landausches Symbol
$P(q)$	Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit (6.44)
$P(q, v)$	klassische Verteilung (6.1)
$P_F(q)$	Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit der Fluß-Lösung (6.52)
$P_b(q)$	Ortsverteilung an der Barriere (6.50)
$P_0(q)$	Ortsverteilung in der Mulde (6.49)

P_{σ_0}	Projektionsoperator auf ein Wellenpaket der Breite σ_0 (5.55)
$Q(t)$	symmetrischer Anteil der Verschiebungskorrelation (5.16)
$Q_0(t)$	$Q(t)$ bei Temperatur Null
q, q'	Ortsvariable, Ortskoordinate des Brownschen Teilchens (2.19)
\bar{q}, \bar{q}'	Anfangs- und Endpunkt des Wegs $\bar{q}(s)$ (2.45)
$\bar{q}(s)$	Imaginärzeitweg des Systems (2.45)
q_b	Lage des Barrierenmaximums (Abb. 2)
q_f, q_i, q'_f, q'_i	Anfangs- und Endpunkte der Wege $q(s)$ und $q'(s)$
q_{c1}	klassischer Weg (2.9), (3.5)
$q_{c1,1}$	stationäre Lösung (3.7)
$q_{c1,2}$	stationäre Lösung (3.8)
q_∞	Langzeitwert der Verschiebungskorrelation für $T=0, s < 1$ (5.52)
R	Widerstand (4.2)
R_N	Widerstand pro Flächeneinheit bei 14 K
R_Q	Widerstandsquantum (4.6)
R_0	Widerstand pro Flächeneinheit bei 0,7 K
R_{ij}	Widerstand zwischen i und j im RSJ-Netzwerk (4.60)
\bar{R}_i	Ort der i -ten Insel (4.17)
r	Summenkoordinate (2.59)
r_i, r_f	Anfangs- und Endort von $r(s)$
r_i^0	Verschiebung (6.22)
\bar{r}_0	Verschiebung (6.25)
S	Wirkung (2.7), (2.46)
S_B	Badanteil der Wirkung (2.51)
S_S	Systemanteil der Wirkung (2.50)
S_{SB}	Kopplungsanteil der Wirkung (2.51)
S^E	euklidische Wirkung (2.17), (2.47)
S_B^E	Badanteil der euklidischen Wirkung (2.51)
S_S^E	Systemanteil der euklidischen Wirkung (2.50)
S_{SB}^E	Kopplungsanteil der euklidischen Wirkung (2.51)
S_b	Wirkung der stationären Lösung an der Barriere (3.9)
\bar{S}_i	Spinvariable im XY-Modell (4.61)
S_0	Wirkung der stationären Lösung in der Mulde (3.9)
S_0	Wirkung zum Variationsansatz (4.16)
$S_{\bar{k}}$	Strukturfaktor (4.18)
S_{Barr}	Wirkung eines Weges unter der Barriere (3.2)
S_{eff}	effektive Wirkung (3.4), (4.10)

S_{eff}^h	effektive Wirkung in harmonischer Näherung (6.46)
$S(t)$	symmetrische Orts-Orts-Korrelation (5.9)
s	Exponent der spektralen Dichte (5.28)
$s(t)$	mittleres Verschiebungsquadrat (5.15)
T	Temperatur
T_c	Sprungtemperatur für Volumensupraleitung
T_0	crossover-Temperatur (3.16)
T^*	kritische Temperatur (4.56)
t	Zeit
U	Spannung (4.2)
u	Kramers-Variable (6.4)
V	Josephsonkopplung (4.7)
V^*	kritischer Wert der Josephsonkopplung bei $\alpha=0$ (4.41)
V_b	Barrierrhöhe (Abb. 2)
V_m	kritische Josephsonkopplung bei $\alpha=1/d$ (4.47)
V_{ij}	Josephsonkopplung zwischen i und j im RSJ-Netzwerk (4.13)
$V_0(\Delta\phi_{ij})$	potentielle Energie im Variationsansatz (4.15)
$V(\Delta\phi_{ij})$	potentielle Energie im Originalmodell (4.15)
$V(q, t)$	Potential (2.19)
v	Geschwindigkeit
v_β	thermische Geschwindigkeit (5.36)
v_∞	Verbreitungsgeschwindigkeit für $s>2$, $T>0$ (5.62)
\bar{W}_B	kanonische Dichtematrix des Bades (2.38)
\bar{W}_0	Anfangsdichtematrix des Gesamtsystems (2.38)
\bar{W}_β	kanonische Dichtematrix des Gesamtsystems (2.39)
$\bar{W}(q_f, x_{n_f}, q'_f, x'_{n_f}, t)$	Dichtematrix des Gesamtsystems (2.45)
$\tilde{W}(v, q)$	Wigner-Transformierte (6.36)
$\tilde{W}_F(v, q)$	Wigner-Transformierte der Flußlösung (6.37)
$\tilde{W}_\beta(v, q)$	Wigner-Transformierte der kanonischen Dichtematrix (6.38)
w_n	Wahrscheinlichkeit, daß $ n\rangle$ vorliegt (2.11)
$w_\infty(q)$	Ortsverteilung für lange Zeiten, $T=0$ und $0<s<1$ (5.53)
x	Differenzkoordinate (2.59)
x_i, x_f	Anfangs- und Endkoordinate von $x(s)$
x_n, x'_n	Ortskoordinate des n -ten Badoszillators (2.22)
$x_{n_f}, x_{n_i}, x'_{n_f}, x'_{n_i}$	Anfangs- und Endpunkte der Wege $x_n(s)$ und $x'_n(s)$
$\bar{x}_n(s)$	Imaginärzeitweg des n -ten Badoszillators (2.45)
x_i^0	Verschiebung (6.23)

\bar{x}_0	Verschiebung (6.26)
y_0	Abkürzung für die Lösung von (4.55)
Z	Zustandssumme (2.50)
Z_B	Badanteil der Zustandssumme (2.51)
Z_b	Barrierenbeitrag zur Zustandssumme (3.19)
Z_0	Muldenbeitrag zur Zustandssumme (3.19)
Z_0	Zustandssumme zum Variationsansatz (4.20)
Z_β	Zustandssumme des kanonischen Zustands (2.13)
z	Zahl der nächsten Nachbarn (4.18)
α	dimensionslose Dämpfungskonstante (4.9)
α_{ij}	Dämpfungsstärke für Josephsonkontakt zwischen i und j (4.13)
β	inverse Temperatur
Γ	Zerfallskonstante (3.1)
Γ_{cl}	klassische Rate (3.24)
$\Gamma(x)$	Γ -Funktion
γ	ohmsche Dämpfungsstärke (2.28)
γ_s	Dämpfungsstärke bei frequenzabhängiger Dämpfung (5.28)
γ_0	effektive Dämpfungsstärke für frequenzabhängige Dämpfung (2.34)
$\gamma(t)$	Dämpfungskern (2.19)
Δ	Betrag des Ordnungsparameters der Supraleitung
$\Delta\phi_{ij}$	Phasendifferenz zwischen i und j im RSJ-Netzwerk (4.12)
ζ_n	Fourierkomponenten von $k(\tau)$ (2.58)
$\zeta(q, v)$	Korrekturfaktor zur klassischen Verteilung (6.2)
$\eta(\tau)$	Imaginärzeitweg (6.45)
κ	Abkürzung im Rubin-Modell (3.30)
Λ	Abkürzung (5.4)
$\Lambda(q)$	Abkürzung (6.48)
λ_n^b	Eigenwerte für die Barrierenlösung (3.14)
λ_n^0	Eigenwerte für die Muldenlösung (3.12)
$\lambda(q, \bar{q}, q', \bar{q}')$	Präparationsfunktion (2.42)
λ^∞	reduzierte Präparationsfunktion (5.47)
$\lambda_\ell^\infty(\bar{r})$	relevanter Anteil der Präparationsfunktion für $T=0$, $0 < s < 1$ (5.54)
μ	Abkürzung (2.55)
ν_n	Matsubara-Frequenzen (2.56)
ξ	Lokalisierungslänge (5.63)

$\xi(s)$	Fluktuationen um den klassischen Weg (2.9)
ρ	Dichteoperator (2.11)
$\rho(q, q')$	Dichtematrix (2.14)
ρ_0	Anfangsdichtematrix des Systems (2.38)
ρ_β	kanonischer Dichteoperator (2.12)
$\rho_F(x_f, r_f)$	Flußlösung (6.35)
$\rho_\beta(q, q')$	kanonische Dichtematrix (2.15)
$\rho_{st}(x_f, r_f)$	stationäre Dichtematrix (6.33)
$\Sigma[x, r, \bar{q}]$	effektive Wirkung (2.62)
$\Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r})$	effektive Wirkung (5.3)
$\Sigma_1(x_f, r_f, t, x_i, r_i)$	zu G_1 gehörende Wirkung (6.20)
$\sigma(t)$	Breite des Wellenpakets (5.59)
σ_0	Anfangsbreite des Wellenpakets (5.55)
τ	imaginäre Zeit
τ_c	Gedächtniskorrelationszeit (2.35)
ν	Massenverhältnis im Rubin-Modell (2.32)
$\Phi[q, q', \bar{q}]$	Exponent des Influenzfunktional (2.52)
ϕ	Phase des Ordnungsparameters der Supraleitung
ϕ	Abkürzung (5.49)
ϕ_i	Phase auf Insel i
$\phi_{\bar{k}}$	räumliche Fouriertransformierte der Phasen
$\phi_n(t)$	Eigenfunktionensystem (3.11)
$\chi(t)$	Antwortfunktion (5.10)
$ \Psi\rangle$	Zustandsvektor
$\Psi(q)$	Wellenfunktion in Ortsdarstellung
$\Psi(x)$	Digamma-Funktion
Ω	Abkürzung (5.6)
ω	Frequenz
ω_D	Drude-Frequenz (2.31)
ω_L	Frequenz im Rubin-Modell (2.32)
ω_R	renormierte Frequenz, Lösung von (3.17)
ω_b	Barrierefrequenz (Abb. 2)
ω_c	Abschneidefrequenz (5.28)
ω_n	Frequenz des n -ten Badoszillators (2.22)
ω_0	Muldenfrequenz (Abb. 2)
ω_0	Frequenz des harmonischen Oszillators (5.1)
w	Geschwindigkeitsverteilung (5.51)

1. Einleitung und Übersicht

Im Jahre 1948 publizierte R. Feynman seine auf Funktionalintegralen basierende Darstellung der Quantenmechanik [1,2]. Diese Methode kommt im Gegensatz zur Heisenbergschen und Schrödingerschen Darstellung ohne Operatoren aus und ist durch ihre besondere Nähe zur klassischen Mechanik ausgezeichnet. Die quantenmechanische Wahrscheinlichkeit, von einem Punkt q_1 in der Zeit t zu einem anderen Punkt q_2 zu kommen, erhält man, indem man zu allen Wegen, die in der Zeit t von q_1 nach q_2 führen, die klassische Wirkung S berechnet und dann den Ausdruck $\exp(iS/\hbar)$ für alle diese Wege aufsummiert. Die alleinige Abhängigkeit von der Wirkung ermöglicht es, ein klassisches System auf einfache Weise zu quantisieren. Neben der Anwendung auf die Quantisierung von klassischen Feldern wurde die Feynmansche Funktionalintegralmethode seit Arbeiten von Caldeira und Leggett [3-5] mit Erfolg zur Beschreibung dissipativer Quantensysteme benutzt.

Bei der Beschreibung von Dissipation in der Quantenmechanik tritt das Problem auf, daß ein nicht explizit zeitabhängiger Hamiltonscher Formalismus Energieerhaltung zur Folge hat und somit keine Dissipation auftreten kann. Im Laufe der Zeit wurden eine Reihe von Möglichkeiten entwickelt, um diese Einschränkung zu umgehen [6]. Die erfolgreichsten Methoden waren lange die quantenmechanischen Versionen der Langevin- und der Mastergleichung [6,7]. Praktisch lassen sich diese jedoch nur auf schwach gedämpfte Systeme anwenden. Ihr Erfolg gründet sich vor allem auf Anwendungen in der Quantenoptik [8] und der Spinrelaxation [9], wo diese Voraussetzung im allgemeinen gut erfüllt ist. In den letzten Jahren interessiert man sich verstärkt auch für Systeme, bei denen die Dämpfung stark sein kann und wo die Temperatur so niedrig ist, daß Quanteneffekte eine wichtige Rolle spielen. Ein Beispiel von sehr großem experimentellem [10] wie auch theoretischem [11] Interesse sind Josephsonsysteme, insbesondere im Zusammenhang mit makroskopischem Quantentunneln und makroskopischer Quantenkohärenz, wo es um das quantenmechanische Verhalten eines makroskopischen Freiheitsgrades, wie zum Beispiel des magnetischen Flußes, geht. Funktionalintegralmethoden wurden hier eingesetzt, um nichtstörungstheoretische Resultate in der Dämpfung zu erhalten.

Bei der Verwendung von Funktionalintegralen in der statistischen

Mechanik unterscheidet man zwischen Imaginär- und Realzeitmethoden. Am Anfang dieser Einleitung hatten wir beschrieben, wie man einen zeitlichen Propagator berechnen kann. Es zeigt sich, daß zwischen der Temperatur und der imaginären Zeit eine enge Analogie besteht. Führt man daher eine Rechnung in imaginärer Zeit durch, so erhält man statt dem Propagator die Gleichgewichtsdichtematrix. Bei der Verwendung von Imaginärzeitfunktionalintegralen muß man also alle gewünschte Information aus der Gleichgewichtsdichtematrix herausholen. Im allgemeinen wird dazu die Zustandssumme bestimmt, die den Ausgangspunkt für die Herleitung weiterer thermodynamischer Größen bildet. Die Realzeitfunktionalintegralmethode erlaubt es, die Dynamik eines Systems zu beschreiben. Man berechnet dazu einen Propagator und benötigt gegebenenfalls für den Anfangszustand noch ein Imaginärzeitfunktionalintegral. Dabei stellt sich die Frage, wie der Anfangszustand anzusetzen ist. Im Rahmen der Funktionalintegralmethoden beschreibt man Dissipation, indem man das System an weitere Freiheitsgrade, das sogenannte Wärmebad, ankoppelt, wobei die Dämpfung durch den Energieaustausch zwischen System und Bad verursacht wird. Man eliminiert im ersten Schritt diese Freiheitsgrade, da nur ihre effektive Auswirkung auf das System von Interesse ist. Sind unendlich viele Freiheitsgrade vorhanden, so erhält man nach der Badelimination einen in der Zeit nichtlokalen, dissipativen Beitrag zur Wirkung. Feynman und Vernon [12] haben dies bereits 1963 für den Fall untersucht, daß der Anfangszustand in einen Zustand des Systems und den Gleichgewichtszustand des Bades faktorisiert. Diese häufig in der Literatur gemachte Annahme vernachlässigt jedoch anfängliche Korrelationen zwischen System und Bad. Wir wollen daher diese Faktorisierung vermeiden und eine realistischere Anfangspräparation verwenden. Dadurch wird zwar die Rechnung aufwendiger, es werden aber automatisch Symmetrien wie das Fluktuations-Dissipations-Theorem erfüllt.

In dieser Arbeit werden verschiedene Anwendungen der Funktionalintegralmethode auf dissipative Quantensysteme diskutiert und zwar sowohl in Imaginärzeit in den Kapiteln 3 und 4 als auch in Realzeit in den Kapiteln 5 und 6.

Voraussetzung für das Verständnis dieser Teile ist das Kapitel 2. Es gibt zunächst eine kurze Einführung in das Konzept der Feynmanschen Darstellung der Quantenmechanik. Anschließend wird diskutiert, wie Dis-

sipation in diesen Formalismus eingebaut wird. Die für die Realzeitrechnung wichtige Frage der Präparation von Anfangszuständen wird erläutert. Zum Abschluß wird die Elimination des Bades sowohl für Realzeit als auch Imaginärzeit durchgeführt, womit die Grundlagen für die folgenden Kapitel bereitgestellt sind.

Die Kapitel 3 bis 6 können weitgehend unabhängig voneinander verstanden werden, wobei allerdings die Diskussion des gedämpften harmonischen Oszillators im Abschnitt 5.1. auch für die Barrierendynamik im Kapitel 6 benötigt wird. Außerdem gibt es immer wieder Querverbindungen, wie zum Beispiel zwischen dem dritten und dem sechsten Kapitel, die das gleiche Problem aus verschiedenen Richtungen betrachten, als auch zwischen dem vierten und fünften Kapitel.

Das Thema des dritten Kapitels ist die Imaginärzeitbehandlung von Metastabilität unter dem Einfluß von Dissipation. Ein metastabiler Zustand befindet sich in einem lokalen Minimum der Energie, aus dem er nur durch thermische Aktivierung oder quantenmechanisches Tunneln entweichen kann. Dies ist eine Situation, die in der Physik sehr häufig auftritt, und daher auch schon lange untersucht wird. Arrhenius [13] fand Ende des letzten Jahrhunderts aufgrund experimenteller Daten für eine chemische Reaktion das nach ihm benannte Gesetz, das die thermische Aktivierung über eine Barriere beschreibt. Gamow [14] untersuchte schon in der Anfangszeit der Quantenmechanik mittels der WKB-Methode den Einfluß des quantenmechanischen Tunneleffekts auf den Zerfall metastabiler Zustände. Große Bedeutung für das Verständnis der klassischen Metastabilität hat die Arbeit von Kramers [15] aus dem Jahr 1940, in der das Problem mittels einer Fokker-Planck-Gleichung angegangen wird. Für eine ausführliche Diskussion der verschiedenen Ansätze verweisen wir auf die Arbeit von Hänggi [16]. Als Systeme, bei denen Metastabilität eine wichtige Rolle spielt, seien genannt die Diffusion von Atomen auf Oberflächen [17] und von leichten Teilchen in Festkörpern [18], die Wanderung von Liganden in Biomolekülen [19] und der bereits oben erwähnte Zerfall des spannungslosen Zustandes eines Josephsonkontaktes [10,11]. Allen Beispielen ist gemeinsam, daß es äußere Freiheitsgrade gibt, die als Wärmebad wirken und zu Dissipation Anlaß geben können.

Bei der Berechnung der Zerfallsrate in Imaginärzeit stößt man auf das Problem, daß die Zustandssumme wegen des nach unten nicht beschränkten

Potentials divergiert. Wir verwenden daher eine auf Langer [20] zurückgehende Methode, die eine analytische Fortsetzung vorschreibt und auf eine komplexe Zustandssumme führt. Nach Affleck [21] kann man dann den Imaginärteil der freien Energie mit der Zerfallsrate in Verbindung bringen.

Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf den Bereich, der durch das thermische Hüpfen dominiert ist und untersuchen die Rolle von Quantenkorrekturen. Wir werden besonders der Frage nachgehen, welche Rolle Gedächtniseffekte spielen. Vor allem in chemischen Systemen sind die relevanten Zeitskalen so, daß man erwarten kann, daß diese Effekte von Bedeutung sind.

Im vierten Kapitel beschäftigen wir uns mit dem Einfluß von Dissipation auf ein Netzwerk von Josephsonkontakten. Unter Verwendung eines perkolationsartigen Arguments lassen sich sogar stark ungeordnete Systeme beschreiben. Die Ergebnisse sind dann möglicherweise auf Experimente von Goldman und Mitarbeitern [22-24] an granularen Supraleitern anwendbar. Die experimentellen Daten lassen sich dahingehend interpretieren, daß es, unabhängig von der speziellen Probe, einen scheinbar universellen Probenwiderstand gibt, der unterschritten werden muß, damit die Probe bei tiefen Temperaturen globale Supraleitung zeigt. Dies ist überraschend, da üblicherweise davon ausgegangen wurde, daß Ladungsfluktuationen die Supraleitung zerstören, womit der Übergang auch von der Geometrie des granularen Materials abhängen würde.

Wir werden daher versuchen, mit einem speziellen Modell den Einfluß von Dissipation auf solche Systeme zu studieren. Da dies schon im dämpfungslosen Fall nicht exakt möglich ist, wenden wir eine Variationsrechnung an, um im Rahmen der Imaginärzeitfunktionalintegralmethode zu Aussagen über das Phasendiagramm zu kommen. Dabei findet man für schwache Josephsonkopplung für geordnete Systeme tatsächlich, daß der Übergang zu globaler Supraleitung allein von der Dämpfungsstärke bestimmt wird.

Mit Beginn des fünften Kapitels wenden wir uns der Realzeitfunktionalintegralmethode zu. Zunächst werden die wichtigsten Resultate für den gedämpften harmonischen Oszillator zusammengestellt, da diese den Ausgangspunkt für die Betrachtungen in den Kapiteln 5 und 6 bilden. Eine ausführliche Herleitung findet man in [25] und [26]. Der Hauptteil des

Kapitels beschäftigt sich mit dem gedämpften freien Teilchen. Obwohl dieses wohl das einfachste gedämpfte System darstellt, zeigt es eine große Vielfalt von verschiedenen Verhaltensweisen wenn man gewisse Eigenschaften des Wärmebades variiert. Untersucht wird insbesondere, wie sich das Teilchen unter einer äußeren Kraft verhält, sein diffusives Verhalten sowie das Zerfließen lokalisierter Zustände. Vor allem die Diffusion ist ein Phänomen, das in vielen Anwendungen eine Rolle spielt. Des weiteren ergeben sich auch interessante Verbindungen zur Bewegung eines gedämpften Teilchens in einem periodischen Potential, das Gegenstand zahlreicher Untersuchungen ist [27].

Unsere Ergebnisse für den Spezialfall ohmscher Dämpfung wurden teilweise bereits von Hakim und Ambegaokar [28] abgeleitet, die als erste nichtfaktorisierte Anfangsbedingungen für das freie Teilchen verwendeten. Deren Anfangsbedingungen sind als Spezialfall in unserer Methode, einen Anfangszustand zu präparieren, enthalten. Es sei noch darauf hingewiesen, daß man nicht immer die Funktionalintegraldarstellung benötigt, um zu Ergebnissen zu kommen. So kann man zum Beispiel viele Resultate für das freie gedämpfte Teilchen auch über die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen erhalten [29].

Nach dem gedämpften harmonischen Oszillator und dem freien gedämpften Teilchen wenden wir uns im sechsten Kapitel der Dynamik an einer parabolischen Barriere zu. Für höhere Temperaturen, bei denen der Zerfall eines metastabilen Zustands durch lokale Eigenschaften von Mulde und Barriere bestimmt ist, können wir aus der Realzeitrechnung die Zerfallsrate metastabiler Systeme erhalten. Damit sind wir wieder beim Thema des dritten Kapitels angelangt. Da die Gültigkeit der Langerschen Technik für dissipative Systeme bis jetzt noch nicht bewiesen wurde, ist es wichtig, mit Hilfe des Realzeitfunktionalintegrals die Resultate der Imaginärzeitrechnung aus Kapitel 3 zu überprüfen.

Im Laufe der Rechnung wird sich zeigen, daß eine sehr enge Verwandtschaft zur Kramers-Theorie [15] besteht, deren Quantenkorrekturen wir bestimmen. Wir beschreiben also die quantenmechanische Verallgemeinerung der Kramers-Theorie.

Im letzten Kapitel werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefaßt und ein Ausblick auf zukünftige Entwicklungen gegeben.

2. Funktionalintegrale und dissipative Quantensysteme

In dieser Arbeit werden dissipative Quantensysteme mit Hilfe von Funktionalintegralen beschrieben. Die dafür notwendigen Grundlagen werden in diesem Kapitel bereitgestellt. Zunächst wird gezeigt, wie man die Zeitentwicklung von Zuständen in der Quantenmechanik durch Realzeitfunktionalintegrale berechnen kann. Es wird sich herausstellen, daß zwischen dem quantenmechanischen Propagator und der kanonischen Dichtematrix ein enger Zusammenhang besteht, der auf die Darstellung dieser Dichtematrix als Imaginärzeitfunktionalintegral führt. Da in allen Systemen, die in den folgenden Kapiteln behandelt werden, Dissipation eine wesentliche Rolle spielt, werden wir ein Modell vorstellen, das dissipative Effekte berücksichtigt, indem das zu betrachtende System an ein Wärmebad gekoppelt wird. Dabei wird ein Zusammenhang zwischen den Modellparametern und dem in der entsprechenden klassischen Bewegungsgleichung auftretenden Dämpfungskern hergestellt.

2.1. Der quantenmechanische Propagator in Funktionalintegraldarstellung

In der üblichen Darstellung der Quantenmechanik wird die Zeitentwicklung eines Zustands $|\Psi\rangle$ beschrieben durch die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle, \quad (2.1)$$

wobei H der Hamiltonoperator ist, der wie die entsprechende klassische Hamiltonfunktion durch die Eigenschaften des betrachteten Systems bestimmt ist. Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig, so ergibt sich die zeitliche Entwicklung eines Zustands durch formale Integration der Schrödingergleichung zu

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H t\right] |\Psi(0)\rangle. \quad (2.2)$$

Die Zeitentwicklung in Ortsdarstellung läßt sich dann schreiben als

$$\Psi(q_f, t) = \int dq_i G(q_f, q_i, t) \Psi(q_i, 0), \quad (2.3)$$

wobei wir den Propagator

$$G(q_f, q_i, t) = \langle q_f | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H t\right] | q_i \rangle \quad (2.4)$$

für die Bewegung vom Anfangsort q_i zum Endort q_f eingeführt haben. Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren läßt sich die Propagation über ein Zeitintervall t auch durch die Propagation über zwei Zeitintervalle t_1 und t_2 mit $t=t_1+t_2$ ausdrücken, so daß der Propagator die Halbgruppeneigenschaft

$$G(q_f, q_i, t) = \int dq G(q_f, q, t_2) G(q, q_i, t_1) \quad (2.5)$$

besitzt.

Während man in der Schrödingerschen Quantenmechanik mit Operatoren arbeitet, kommt die Feynmansche Formulierung der Quantenmechanik ohne Operatoren aus. Zudem ist diese Formulierung sehr eng mit der klassischen Beschreibung eines Systems verknüpft, wie wir noch sehen werden. Den Vorteil, nicht mit Operatoren rechnen zu müssen, erkaufte man sich, indem man Funktionalintegrale einführt. Wir wollen das Funktionalintegral am Beispiel des Propagators $G(q_f, q_i, t)$ näher erläutern. Nach Feynman berechnet sich der Propagator gemäß

$$G(q_f, q_i, t) = \int_{q(0)=q_i}^{q(t)=q_f} \mathcal{D}q \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[q]\right]. \quad (2.6)$$

Hier ist S die mit der klassischen Lagrangefunktion \mathcal{L} verknüpfte Wirkung

$$S[q] = \int_0^t ds \mathcal{L}(q, \dot{q}, s), \quad (2.7)$$

wobei wir jetzt auch eine explizite Zeitabhängigkeit der Lagrangefunktion zulassen wollen. Die Wirkung ist ein Funktional, das einem Weg $q(s)$ durch Integration über die zugehörige Lagrangefunktion den Wert S zuordnet. Entsprechend integriert man in (2.6) nicht über einen Wertebereich, sondern über Funktionen, die in die Wirkung einzusetzen sind. Diese

Funktionalintegration wird durch das Symbol \mathcal{D} angedeutet. Die Funktionenklasse, über die zu integrieren ist, wird durch die Randbedingungen $q(0)=q_i$ und $q(t)=q_f$ bestimmt. Jeder Weg, der in der Zeit t von q_i nach q_f führt, gibt also, gewichtet mit einem Phasenfaktor, der durch die zugehörige Wirkung bestimmt wird, einen Beitrag zum Propagator.

Wenn wir den klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ durchführen, erwarten wir, daß der Propagator nur für den klassischen Weg q_{c1} einen Beitrag liefert. Im allgemeinen werden Wege, die in einem gewissen Sinne benachbart sind, eine unterschiedliche Wirkung haben, was dazu führt, daß sich für $\hbar \rightarrow 0$ die Phasenfaktoren $\exp(iS/\hbar)$ praktisch herausheben. Ein wesentlicher Beitrag zum Propagator ergibt sich dann nur von Wegen, für die die Wirkung stationär wird, d.h. bei denen die Funktionalableitung der Wirkung verschwindet. In der klassischen Mechanik wird gezeigt, daß die Forderung

$$\delta S = 0 \tag{2.8}$$

gerade auf die Lagrangesche Bewegungsgleichung führt, die durch den klassischen Weg q_{c1} gelöst wird. Für $\hbar \rightarrow 0$ gibt also tatsächlich nur der klassische Weg einen Beitrag zum Propagator. Quantenkorrekturen zu diesem klassischen Bild ergeben sich dadurch, daß man für endliches \hbar auch die Umgebung des stationären Punktes betrachten muß. Dann tragen auch Wege bei, die sich vom klassischen Weg durch kleine Fluktuationen unterscheiden. Es ist denkbar, daß die klassische Bewegungsgleichung, die ja nicht mit Anfangsbedingungen sondern mit Randbedingungen zu lösen ist, mehrere Lösungen besitzt. Dann sind natürlich zunächst zur Auswertung des Propagators alle stationären Punkte zu betrachten. Eventuell läßt sich aber zeigen, daß einer der stationären Punkte den Hauptbeitrag liefert, und die anderen daher vernachlässigt werden können.

Es stellt sich nun die Frage, wie der Ausdruck (2.6) praktisch auszuwerten ist. Im Prinzip kann man durch Aufteilung der Zeitentwicklung in kleine Schritte der Länge Δt und Verwendung von (2.5) eine diskretisierte Version von (2.6) erhalten, die für $\Delta t \rightarrow 0$ in den angegebenen Ausdruck übergeht. Auf diese Weise kann man z.B. das Integrationsmaß und die zugelassenen Funktionenklassen genauer diskutieren. Wir wollen uns hier jedoch nicht so sehr mit den mathematischen Details des Funktionalintegrals beschäftigen, sondern vielmehr damit, wie es auf praktische

physikalische Fragestellungen angewendet werden kann. Für weitere Informationen über das Funktionalintegral verweisen wir auf die Literatur [2,30,31].

Offensichtlich spielt der klassische Weg q_{c1} bei der Berechnung des Propagators eine wesentliche Rolle. Es liegt daher nahe, eine Entwicklung um den klassischen Weg durchzuführen und

$$q(s) = q_{c1}(s) + \xi(s) \quad (2.9)$$

zu setzen, wobei die Funktion $\xi(s)$ bei $s=0$ und $s=t$ verschwinden muß. Entsprechend entwickelt man die Wirkung

$$S[q] = S[q_{c1}] + \int_0^t ds \left. \frac{\delta S}{\delta q(s)} \right|_{q_{c1}} \xi(s) \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{2} \int_0^t ds \int_0^t du \left. \frac{\delta^2 S}{\delta q(s) \delta q(u)} \right|_{q_{c1}} \xi(s) \xi(u) + \dots$$

Da der klassische Weg ein stationärer Punkt der Wirkung ist, verschwindet der zweite Term auf der rechten Seite. Bricht man die Entwicklung in (2.10) nach der zweiten Ordnung ab, so spricht man von der semiklassischen Näherung. Diese Näherung wird jedoch exakt wenn man, wie es in dieser Arbeit häufig der Fall ist, eine quadratische Wirkung vorliegen hat. Der dritte Term ist dann unabhängig von den Randbedingungen für den Weg $q(s)$, so daß diese nur über die klassische Wirkung $S[q_{c1}]$ in den Propagator eingehen. Bei der praktischen Berechnung von Wegintegralen werden wir also immer zunächst die klassische Bewegungsgleichung aufstellen und mit Hilfe der zugehörigen Lösung die klassische Wirkung berechnen. Der vom dritten Term in (2.10) herrührende Beitrag erzeugt einen Vorfaktor, der entweder, wie bei der Berechnung der freien Energie, keine Rolle spielt oder bereits durch Normierungsforderungen bestimmt werden kann. Im zweiten Fall läßt sich das Vorgehen durch explizite Berechnung des Beitrags der Fluktuationen verifizieren.

2.2. Die kanonische Dichtematrix als Imaginärzeitfunktionalintegral

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, wie die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen, reinen Zustands mit Hilfe eines Funktionalintegrals beschrieben werden kann. Bei der Behandlung von quantenstatistischen Problemen liegen jedoch im allgemeinen keine reinen Zustände vor, sondern Gemische. Diese Gemische werden durch einen sogenannten Dichteoperator repräsentiert, der sich als gewichtete Summe über Projektoren auf Eigenzustände einer gewissen Basis des Hilbertraums darstellen läßt. Liege der Zustand $|n\rangle$ mit einer Wahrscheinlichkeit w_n im Gemisch vor, so ist der Dichteoperator

$$\rho = \sum_n w_n |n\rangle \langle n|. \quad (2.11)$$

Eine besondere Rolle spielt der kanonische Dichteoperator ρ_β , der für ein System, das durch den zeitunabhängigen Hamiltonoperator H beschrieben wird, stationär ist. In diesem Fall sind die Zustände $|n\rangle$ Energieeigenzustände mit Eigenwerten E_n und die Wahrscheinlichkeit, daß ein Zustand $|n\rangle$ im Gemisch vorliegt, ist durch den von der Temperatur $T=1/k_B\beta$ abhängigen Boltzmannfaktor gegeben. Wir haben demnach

$$\rho_\beta = \frac{1}{Z_\beta} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|, \quad (2.12)$$

wobei Z_β die Zustandssumme

$$Z_\beta = \text{Sp}(\rho_\beta) \quad (2.13)$$

bedeutet. Das Symbol "Sp" gibt an, daß über das Argument zu spuren ist.

Die Einführung des Funktionalintegrals für den Propagator im vorigen Abschnitt hatte den Vorteil, daß zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung eines reinen Zustands die Verwendung von Operatoren nicht notwendig war. Um diesen Vorteil auch in der Quantenstatistik nutzen zu können, gehen wir vom Dichteoperator ρ zu seiner Ortsdarstellung

$$\rho(q, q') = \langle q | \rho | q' \rangle \quad (2.14)$$

über. Für die kanonische Dichtematrix ρ_β erhalten wir speziell

$$\rho_\beta(q, q') = \frac{1}{Z_\beta} \langle q | \exp[-\beta H] | q' \rangle. \quad (2.15)$$

Es fällt auf, daß dieser Ausdruck eine sehr große Ähnlichkeit mit dem Propagator in (2.4) hat. Vergleicht man die beiden Exponenten, so liegt es nahe, $t = -i\hbar\beta$ zu setzen und die Temperatur als imaginäre Zeit zu interpretieren. Genauso wie man den Propagator durch das Funktionalintegral (2.6) darstellen kann, läßt sich somit die kanonische Dichtematrix mit Hilfe eines Funktionalintegrals ausdrücken. Zur Unterscheidung sprechen wir bei (2.6) von einem *Realzeitfunktionalintegral*, während wir wegen der Äquivalenz von imaginärer Zeit und Temperatur den entsprechenden Ausdruck für die kanonische Dichtematrix als *Imaginärzeitfunktionalintegral* bezeichnen wollen. Um aus dem Funktionalintegral (2.6) und der Wirkung (2.7) die Funktionalintegraldarstellung von ρ_β zu bekommen, führt man eine sogenannte Wick-Rotation durch. Mit Hilfe von $t = -i\hbar\beta$ werden dabei die Realzeitausdrücke in ihre entsprechenden Imaginärzeitausdrücke überführt. Man erhält

$$\rho_\beta(q, q') = \int_{q(0)=q'}^{q(\hbar\beta)=q} \mathcal{D}q \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S^E[q]\right]. \quad (2.16)$$

Durch die Wick-Rotation ergibt sich aus der Wirkung $S[q]$ die euklidische Wirkung

$$S^E[q] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \mathcal{L}^E(q, \dot{q}, \tau), \quad (2.17)$$

wobei der Lagrangefunktion \mathcal{L} eine euklidische Lagrangefunktion \mathcal{L}^E zugeordnet wurde. Im einfachsten Fall besteht \mathcal{L} aus zwei Anteilen, der kinetischen und der potentiellen Energie. Hier wird durch die Wick-Rotation lediglich das Vorzeichen der potentiellen Energie geändert. Die zugehörige klassische Bewegungsgleichung beschreibt dann also die Bewegung im invertierten Potential. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß ein eventueller dissipativer Anteil in der Bewegungsgleichung nach einer Wick-

Rotation nicht mehr notwendigerweise dissipativ ist. Ein konkretes Beispiel für die Wirkung und ihr euklidisches Analogon wird im Abschnitt 2.5. gegeben.

Die Imaginärzeitfunktionalintegraldarstellung (2.16) der kanonischen Dichtematrix wird ausreichen, um im Kapitel 3 die Zerfallsrate metastabiler Systeme zu berechnen und im Kapitel 4 den Einfluß von Dissipation auf granulare, supraleitende Filme zu diskutieren. Dabei geht es im wesentlichen darum, über die Zustandssumme die freie Energie zu bestimmen. Will man jedoch die zeitliche Entwicklung eines Systems untersuchen, so benötigt man Realzeitfunktionalintegrale, um die Propagatoren in der Zeitentwicklung der Dichtematrix

$$\rho(q_f, q'_f, t) = \int dq_i dq'_i G(q_f, q_i, t) \rho(q_i, q'_i, 0) G^*(q'_f, q'_i, t) \quad (2.18)$$

darzustellen. (2.18) erhält man durch Einsetzen von (2.2) in (2.11). Die Methode der Realzeitfunktionalintegrale werden wir in den Kapiteln 5 und 6 am freien Teilchen und der Barrierendurchdringung illustrieren.

2.3. Modell für dissipative Systeme

Ein wesentliches Merkmal von Dissipation ist es, daß ein Freiheitsgrad an viele andere Freiheitsgrade mit mittlerer Energie $k_B T/2$ gekoppelt ist. Dabei interessieren wir uns nicht für die Details der Bewegung des Gesamtsystems, sondern nur des einen Freiheitsgrades, den wir im weiteren auch als System bezeichnen. Die Gesamtheit der anderen Freiheitsgrade nennen wir Wärmebad. Das Wärmebad befinde sich im thermischen Gleichgewicht und sei durch seine Temperatur T charakterisiert. Die Kopplung zwischen dem System, das sich im allgemeinen nicht im thermischen Gleichgewicht mit dem Bad befindet, und dem Wärmebad ermöglicht einen Energieaustausch zwischen beiden. Wir setzen voraus, daß das Wärmebad groß genug ist, so daß der Energieaustausch das thermische Gleichgewicht der Badfreiheitsgrade nicht stört. Die Kopplung zwischen System und Bad hat zur Folge, daß ein hochangeregter Systemfreiheitsgrad im Laufe der Zeit seine Energie an das Bad abgibt. Neben diesem dissipativen Effekt verursacht die Kopplung, die einen Energieaustausch zwischen System und Bad in beiden Richtungen erlaubt, auch Fluktuationen der Systemvariablen. Beide Effekte sind nicht unabhängig voneinander, sondern durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem eng verknüpft [32].

Im Prinzip kann man zur Beschreibung eines dissipativen Systems ein mikroskopisches Modell aufstellen. Dazu ist es jedoch notwendig, daß man den Dissipationsmechanismus kennt, also die Natur der Badfreiheitsgrade und deren Ankopplung an das System. Dies ist jedoch häufig nicht der Fall. Außerdem erscheint es wünschenswert, ein relativ universelles Modell für dissipative Systeme aufzustellen, das es unabhängig vom speziellen mikroskopischen Mechanismus erlaubt, das Wesen dieser Systeme zu verstehen. Wir wählen daher einen eher phänomenologischen Zugang, der jedoch der Einsicht, daß Dissipation durch Kopplung an andere Freiheitsgrade zustande kommt, Rechnung trägt. Die benötigte Information über das Wärmebad erhalten wir dabei aus dem klassischen Verhalten des Systems. Wir gehen davon aus, daß die Bewegung des Systemfreiheitsgrades klassisch durch die gedämpfte Bewegungsgleichung

$$M\ddot{q} + M\int_0^t ds \gamma(t-s)\dot{q}(s) + \frac{\partial V(q, t)}{\partial q} = 0 \quad (2.19)$$

gegeben ist. Dabei muß q nicht unbedingt eine Ortskoordinate sein, es kann beispielsweise auch die Phasendifferenz eines Josephsonkontaktes sein. Die für die Dissipation charakteristische Größe ist der Dämpfungskern $\gamma(t-s)$. Zwar kann man sich andere gedämpfte Bewegungsgleichungen vorstellen, jedoch beinhaltet (2.19) den wichtigen Grenzfall der ohmschen Dämpfung, wobei der Dämpfungsterm $M\gamma\dot{q}(t)$ ist. Des weiteren läßt sich hiermit auch Dämpfung mit Gedächtnis untersuchen. Das Modell, das wir für die quantenmechanische Beschreibung verwenden, soll im klassischen Limes auch auf diese Bewegungsgleichung führen. Die Parameter des Modells erhält man dann durch Vergleich der beiden klassischen Bewegungsgleichungen.

Durch Angabe der Lagrangefunktion kennen wir einerseits die zugehörige klassische Dynamik, andererseits können wir mit Hilfe des Funktionalintegralformalismus auch Dissipation in die Quantenmechanik einführen. Das Modell, das im weiteren diskutiert werden soll, beschreibt die Badfreiheitsgrade durch harmonische Oszillatoren, die linear an den Systemfreiheitsgrad gekoppelt sind, jedoch untereinander nicht wechselwirken. Die Lagrangefunktion des Gesamtsystems ist also gegeben durch

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_S + \mathcal{L}_B + \mathcal{L}_{SB} \quad (2.20)$$

mit dem Systemanteil

$$\mathcal{L}_S(q, \dot{q}) = \frac{M}{2} \dot{q}^2 - V(q, s), \quad (2.21)$$

dem Badanteil

$$\mathcal{L}_B(x_n, \dot{x}_n) = \sum_{n=1}^N \left[\frac{m_n}{2} \dot{x}_n^2 - \frac{m_n}{2} \omega_n^2 x_n^2 \right], \quad (2.22)$$

sowie der Kopplung

$$\mathcal{L}_{SB}(q, x_n) = \sum_{n=1}^N \left[c_n q x_n - q^2 \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \right]. \quad (2.23)$$

Die Systemkoordinate wird also im folgenden q genannt, während x_n die Badfreiheitsgrade bezeichnet. Die zugehörige euklidische Lagrange-Funktion \mathcal{L}^E , die wir für das Imaginärzeitfunktionalintegral benötigen, ergibt sich aus (2.20-2.23) durch Ändern des Vorzeichens der Potentialterme. Dieses Modell besitzt eine Reihe von zunächst freien Parametern, nämlich die Massen m_n der Badoszillatoren, deren Frequenzen ω_n , sowie die Stärke c_n der Kopplung des n -ten Oszillators an das System. Um die Verbindung zwischen diesen Größen und dem Dämpfungskern $\gamma(t)$ herzustellen, müssen wir das klassische Modell betrachten. Aus (2.20-23) lassen sich leicht die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen für die Oszillatoren herleiten. Man löst nun die Gleichungen für die Badoszillatoren, wobei die Kopplung an den Systemoszillator als zunächst beliebige, zeitabhängige Kraft zu betrachten ist. Unter Verwendung dieser Lösungen erhält man aus der Bewegungsgleichung für den Systemoszillator eine effektive Bewegungsgleichung vom Typ (2.19) mit

$$\gamma(t) = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \cos(\omega_n t). \quad (2.24)$$

Bei Verwendung geeigneter Parameter läßt sich also praktisch jeder Dämpfungskern modellieren. Die Diskussion der effektiven, klassischen Bewegungsgleichung erklärt auch den zweiten, in q quadratischen Term im Kopplungsanteil der Lagrangefunktion, der auf den ersten Blick etwas überflüssig scheint. Durch die Ankopplung des Systems an die Badoszillatoren wird jedoch das Potential verschoben. Will man das Potential $V(q,s)$ im Modell mit dem physikalischen Potential in (2.19) identifizieren, so muß man diese Potentialrenormierung in der Lagrangefunktion wie angegeben berücksichtigen.

Es läßt sich zeigen, daß das hier vorgestellte Modell im Rahmen einer linearen Antwort-Theorie, in der die Reaktion des Bades auf eine vom System ausgehende Störung linear ist, exakt ist [4]. Obwohl man sich auch andere Bäder vorstellen kann, ist somit unser Ansatz sehr allgemein wenn man voraussetzt, daß jeder Badfreiheitsgrad nur schwach gestört wird. Es sei betont, daß dies keine Einschränkung auf den Fall schwacher Dämpfung bedeutet, da durch das Vorhandensein sehr vieler Badoszillatoren durchaus insgesamt starke Dämpfung möglich ist. Im Rahmen der linearen Antwort-Theorie erhält man den Dämpfungskern (2.24) auch mit Hilfe der Green-Kubo-Formel [32] aus der Kraft-Kraft-Korrelation $\langle \kappa(t)\kappa(0) \rangle$, wobei $\kappa(t)$ die von allen Badoszillatoren zur Zeit t auf das System wirkende Kraft ist.

Bis jetzt kann man dem Modell noch vorwerfen, daß es eigentlich gar nicht dissipativ sei. Falls das Potential zum Beispiel harmonisch ist, läßt sich die Lagrangefunktion auf eine Darstellung in Normalkoordinaten transformieren, womit das Problem integrabel ist und somit sicher keine Dissipation auftritt. Vom System aus gesehen bedeutet das, daß es seinen Anfangszustand nach einer endlichen Zeit, der Poincaréschen Wiederkehrzeit, wieder einnimmt. Um mit diesem Modell Dissipation zu beschreiben, muß man deshalb eine kontinuierliche Ansammlung von Badoszillatoren betrachten, so daß die Poincarésche Wiederkehrzeit gegen Unendlich geht.

Wie wir in (2.24) gesehen haben, ist nur eine Kombination der Modellparameter für die Dynamik des Systems relevant. Es ist zweckmäßig, eine spektrale Dichte der Badoszillatoren

$$I(\omega) = \pi \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (2.25)$$

einzuführen, die eine Kombination aus der Zustandsdichte des Bades und der frequenzabhängigen Kopplungsstärke darstellt. Mit Hilfe der spektralen Dichte kann man leicht von einem diskreten Satz von Oszillatoren zu einer kontinuierlichen Verteilung übergehen, wenn man

$$\sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} f(\omega_n) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} I(\omega) f(\omega). \quad (2.26)$$

berücksichtigt, wobei f eine beliebige Funktion ist. Speziell erhält man mit (2.24) für den Zusammenhang zwischen spektraler Dichte $I(\omega)$ und Dämpfungskern

$$\gamma(t) = \frac{2}{M} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{I(\omega)}{\omega} \cos(\omega t). \quad (2.27)$$

Damit ist bei Vorgabe des Dämpfungskerns die funktionale Gestalt der spektralen Baddichte festgelegt. $I(\omega)$ und die Temperatur sind damit die einzigen relevanten Größen des Wärmebades. Häufig interessiert man sich für das Langzeitverhalten eines Systems, das durch die niederfrequenten Badmoden bestimmt ist. Man setzt dann, wie wir es zum Beispiel beim freien Brownschen Teilchen tun werden, $I(\omega) \sim \omega^s$ und diskutiert das Problem in Abhängigkeit vom Exponenten s .

Wir wollen jetzt einige Beispiele für spektrale Dichte und Dämpfungskern diskutieren. Ein wichtiger und häufig untersuchter Fall ist der ohmscher Dämpfung. Dabei ist die Dämpfung des Systems nur durch dessen momentane Geschwindigkeit bestimmt, das heißt der Dämpfungskern wird

$$\gamma(t) = 2\gamma \cdot \delta(t). \quad (2.28)$$

Die Größe, die nun allein den Einfluß des Bades auf das System bestimmt, ist die Dämpfungsstärke γ . Die zugehörige spektrale Baddichte lautet

$$I(\omega) = M\gamma\omega, \quad (2.29)$$

in diesem Fall ist also $s=1$. Wir werden bei der Behandlung des freien

Brownschen Teilchens sehen, daß dem Fall $s=1$ gegenüber Bädern mit $s \neq 1$ eine Sonderstellung zukommt. Führt man die Laplace-Transformierte $\hat{\gamma}(z)$ des Dämpfungskerns gemäß

$$\hat{\gamma}(z) = \int_0^{\infty} ds \gamma(s) \exp(-zs) \quad (2.30)$$

ein, so findet man für die ohmsche Dämpfung $\hat{\gamma}(z)=\gamma$. Eine besondere Eigenschaft ist somit die frequenzunabhängige Dämpfung. Aus (2.29) schließt man jedoch, daß es bei beliebig hohen Frequenzen effektiv immer mehr Oszillatoren geben muß. Dies ist nicht sehr realistisch. Man führt daher häufig eine Abschneidefunktion ein, die Hochfrequenzdivergenzen verhindert. Eine Möglichkeit ist es, oberhalb der Abschneidefrequenz ω_c keine Oszillatoren mehr zuzulassen. Dies wäre eine sehr gute Näherung für die Ankopplung an Phononen, bei denen die obere Grenze durch die Debye-Frequenz gegeben ist. Eine andere, gelegentlich benutzte Möglichkeit ist die Verwendung des Drude-Modells. Man setzt

$$\gamma(t) = \gamma \omega_D \exp(-\omega_D t) \quad (2.31)$$

und gibt somit der Dämpfung ein auf der Zeitskala $1/\omega_D$ abfallendes Gedächtnis. Für Zeiten $t \gg 1/\omega_D$ verhält sich das System jedoch, wie wenn es ohmsch gedämpft würde. In diesem Regime, wenn also die Ergebnisse nicht von der Abschneidefrequenz und von der speziellen Form der Abschneidefunktion abhängen, wollen wir weiterhin von ohmscher Dämpfung sprechen. Im allgemeinen ist nur die niederfrequente spektrale Dichtefunktion von Bedeutung, die im ohmschen Fall proportional zur Frequenz ist.

Nachdem wir mit dem Drude-Modell bereits Dämpfung mit Gedächtnis kennengelernt haben, wollen wir ein weiteres Modell dieser Art betrachten, das sogenannte Rubin-Modell [33]. Dieses unterscheidet sich vom Drude-Modell dadurch, daß der Dämpfungskern nicht exponentiell mit der Zeit abfällt, sondern nur algebraisch. Zur Motivation wollen wir das folgende mechanische Modell betrachten. Ein Teilchen der Masse M bewege sich in einem externen Potential $V(q)$. Diese Masse sei mit je einer Feder der Federkonstanten K an zwei Ketten gekoppelt, die aus Massen m bestehen, die wiederum durch Federn mit Federkonstante K untereinander ge-

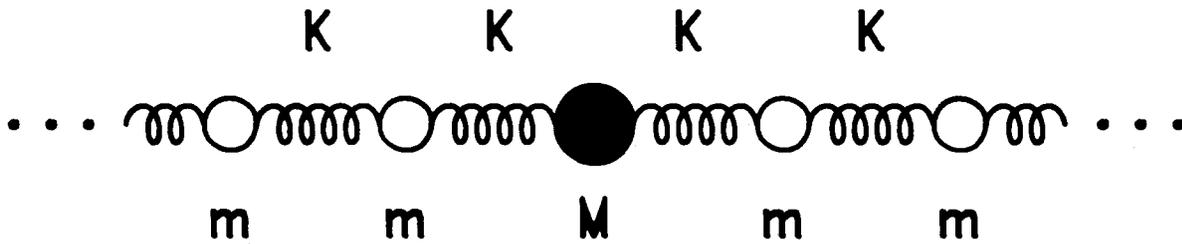


Abb. 1: Mechanische Realisierung des Rubin-Modells

koppelt sind. Dieses Modell unterscheidet sich von dem bisher betrachteten dadurch, daß die Badfreiheitsgrade aneinander koppeln. Die Badoszillatoren lassen sich jedoch in eine Normalmodendarstellung bringen, so daß das Rubin-Modell letztlich auch in die Klasse der Modelle (2.20-23) gehört. Durch die "mikroskopische" Vorgabe des Bades ist jetzt jedoch der Dämpfungskern bestimmt. Eliminiert man die Badfreiheitsgrade, so erhält man eine Gleichung vom Typ (2.19) mit

$$\gamma(t) = v\omega_L J_1(\omega_L t)/t. \quad (2.32)$$

Wir haben dabei das Massenverhältnis $v=m/M$ und $\omega_L=2(K/m)^{1/2}$ als typische Frequenz der Ketten eingeführt. J_1 ist die Besselfunktion erster Gattung und erster Ordnung. Der Dämpfungskern oszilliert also als Funktion der Zeit und zerfällt für lange Zeiten nur algebraisch wie

$$\gamma(t) \sim v(2\omega_L/\pi)^{1/2} \sin(\omega_L t - \pi/4) t^{-3/2}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (2.33)$$

Definieren wir die Dämpfungsstärke für Dämpfung mit Gedächtnis

$$\gamma_0 = \int_0^{\infty} dt \gamma(t) \quad (2.34)$$

und die Gedächtniskorrelationszeit

$$\tau_c = \frac{1}{\gamma_0} \int_0^{\infty} dt t\gamma(t), \quad (2.35)$$

so erhalten wir für das Rubin-Modell

$$\gamma_0 = v\omega_L \quad (2.36)$$

und

$$\tau_c = \frac{1}{\omega_L}. \quad (2.37)$$

Durch geeignete Wahl der Parameter v und ω_L können wir somit die Grenzübergänge zu Dämpfung ohne Gedächtnis und zu schwacher Dämpfung durchführen.

Das Drude- und das Rubin-Modell verhalten sich bei kleinen Frequenzen und damit für lange Zeiten wie ein ohmsches Bad. Selbst die Ankopplung an ein Elektronenbad läßt sich durch ein ohmsches Bad erfassen [34]. Zwar besteht das Elektronenbad aus Fermionen, während unser Modell, das auf harmonischen Oszillatoren basiert, bosonisch ist. Man kann jedoch mit Hilfe der sogenannten Bosonisierung den Fermionen-Hamiltonoperator auf einen Bosonen-Hamiltonoperator abbilden, und es läßt sich dann zeigen, daß sich die Elektron-Loch-Anregungen des Elektronenbades unter gewissen Umständen durch ein Bosonenbad beschreiben lassen. Der Exponent $s=1$ ist jedoch nicht der einzige, der in der Natur realisiert ist. Durch Ankopplung an Phononen kann man eine ganze Reihe von verschiedenen Exponenten s erhalten, da die spektrale Dichte sowohl durch die Zustandsdichte der Badmoden als auch durch die Ankopplung des Bades an das System bestimmt wird. Untersucht man beispielsweise den Einfluß von Dissipation auf Tunnelzentren, so muß man in Abhängigkeit von der Symmetrie des Gitterplatzes in einem d -dimensionalen System $s=d$ oder $s=d+2$ setzen [35]. Man könnte sich sogar vorstellen, daß s einen nicht-ganzzahligen Wert annimmt. In Analogie zur Ankopplung an Phononen kann man die Ankopplung an Fraktonen, also die entsprechenden Anregungen in Fraktalen, betrachten. Die niederfrequente Zustandsdichte der Fraktonen ist gegeben durch die spektrale Dimension \bar{d} des Fraktals, welche nicht-ganzzahlige Werte annehmen kann. Damit kann auch s nichtganzzahlig werden. Im Prinzip sind also sehr verschiedene Wärmebäder denkbar. Die einzige Einschränkung an den Exponenten s , die aus der Forderung nach der Existenz des Dämpfungskerns folgt, ist nach (2.27), daß $s>0$ ist.

2.4. Präparation von Anfangszuständen

Im Rahmen von Imaginärzeitrechnungen betrachtet man im allgemeinen die freie Energie, so daß man mit der Funktionalintegraldarstellung der kanonischen Dichtematrix ρ_β auskommt. Die Notwendigkeit, Realzeitfunktionalintegrale zu betrachten, ergibt sich dagegen aus dem Wunsch, die Dynamik von Nichtgleichgewichtszuständen zu beschreiben. Durch die Stationarität der kanonischen Dichtematrix ist diese relativ uninteressant, wenn man von der Möglichkeit absieht, den Einfluß einer äußeren, eventuell zeitabhängigen Kraft zu diskutieren. Bei der Präparation eines Nichtgleichgewichtszustandes für die Realzeitrechnung werden wir sinnvollerweise fordern, daß das Wärmebad im Gleichgewicht ist, da dieses sonst nicht seine Funktion als Bad erfüllen kann. Ein Ansatz, der wegen seiner rechentechnischen Einfachheit häufig verwendet wurde und wird, ist der faktorisierte Anfangszustand

$$W_0 = \rho_0 \cdot W_B. \quad (2.38)$$

Dabei ist W_0 die Anfangsdichtematrix für das Gesamtsystem, ρ_0 diejenige für das System und W_B die kanonische Dichtematrix des Bades. Da man sich nicht für die Einzelheiten der Baddynamik interessiert, kann man das Bad leicht herausspüren und es bleibt zur Bestimmung der Dynamik nur noch die Berechnung eines zweifachen Realzeitfunktionalintegrals. Der zur Dichtematrix gehörende Propagator läßt sich also unabhängig vom Anfangszustand berechnen. Dieser Ansatz hat jedoch den Nachteil, daß er anfängliche Korrelationen zwischen System und Bad vollkommen unberücksichtigt läßt. In Wirklichkeit läßt sich aber im allgemeinen das System nicht vom Bad trennen, insbesondere dann nicht, wenn System und Bad gleichzeitig Bestandteile eines makroskopischen Systems, wie beispielsweise in einem Josephsonkontakt, sind. Wir wollen daher in dieser Arbeit einem anderen Anfangszustand den Vorzug geben. Die Idee ist, zunächst solange zu warten, bis das Gesamtsystem im Gleichgewicht W_β ist. Zur Erzeugung eines Nichtgleichgewichtszustands läßt man eine Störung wirken, die jedoch nur den Systemfreiheitsgrad q betreffen soll. Der Anfangszustand ist dann durch

$$W_0 = \sum_j O_j W_\beta O_j' \quad (2.39)$$

beschrieben, wobei O_j und O'_j die nur im Hilbertraum des Systems wirkenden Störoperatoren sind. Für diesen recht allgemeinen Ansatz lassen sich eine Reihe von Anwendungen finden. Der einfachste Fall ist natürlich der, daß die Störoperatoren gleich Eins-Operatoren sind und somit die Anfangsdichtematrix durch die kanonische Dichtematrix gegeben ist. Damit läßt sich die Antwort des Gleichgewichtszustands auf eine äußere, zeitabhängige Kraft diskutieren. Umgekehrt kann man während der Präparation eine konstante, äußere Kraft einschalten und dann die Relaxation ins Gleichgewicht betrachten. Dabei handelt es sich um einen Spezialfall des ersten Falles. Interessant ist die Möglichkeit, während der Präparation eine Messung am System vorzunehmen. Die Operatoren O_j und O'_j beschreiben hier die Wirkung der Meßapparatur [36] und können zum Beispiel durch Projektoren auf die entsprechenden Zustände des Systemhilbertraumes dargestellt werden. Eine Anwendung ist die Beschreibung des Zerfließens eines Wellenpakets beim freien Brownschen Teilchen. Verwendet man als Störoperatoren Verschiebungsoperatoren und squeeze-Operatoren, so hat man die Möglichkeit, das Verhalten von kohärenten Zuständen und konzentrierten Zuständen (squeezed states) zu untersuchen [25,37]. Bei allen soweit diskutierten Beispielen handelte es sich bei den Anfangszuständen um Dichtematrizen. Für die Berechnung der Zeitentwicklung ist dies jedoch keine notwendige Voraussetzung. Man kann sogar allgemeinere Zustände, wie zum Beispiel BW_β , betrachten, wobei B ein Operator sei, der einer Observablen zugeordnet ist. Berechnet man den Erwartungswert eines Operators A bezüglich eines Zustands, der durch die Zeitentwicklung aus BW_β zur Zeit t entstanden ist, so erhält man die Gleichgewichts-Korrelationsfunktion $\langle A(t)B \rangle_\beta$, die mit Wirkungsquerschnitten von Streuexperimenten verknüpft ist [38]. Für uns werden diese Korrelationen im Zusammenhang mit der Interpretation von Termen im Propagator von Bedeutung sein.

Da wir im Rahmen des Imaginärzeitfunktionalintegrals den Dichteoperator in seiner Ortsdarstellung betrachten, wollen wir noch den Anfangszustand W_0 aus (2.39) in die Ortsdarstellung überführen. Die Ortsdarstellung von W_0 im Hilbertraum von System und Bad lautet

$$W_0(q, x_n, q', x'_n) = \langle q, x_n | W_0 | q', x'_n \rangle. \quad (2.40)$$

Führt man die Matrixelemente der Störoperatoren $O_j(q, \bar{q}) = \langle q | O_j | \bar{q} \rangle$ und

$O'_j(\bar{q}', q') = \langle \bar{q}' | O'_j | q' \rangle$ ein, so läßt sich der Anfangszustand darstellen als

$$W_0(q, x_n, q', x'_n) = \int d\bar{q} \int d\bar{q}' \lambda(q, \bar{q}, q', \bar{q}') W_\beta(\bar{q}, x_n, \bar{q}', x'_n), \quad (2.41)$$

wobei die Präparationsfunktion

$$\lambda(q, \bar{q}, q', \bar{q}') = \sum_j O_j(q, \bar{q}) O'_j(\bar{q}', q') \quad (2.42)$$

die Abweichung des Anfangszustands vom Gleichgewicht beschreibt. Soll das Gesamtsystem bei $t=0$ im Gleichgewicht sein, so gilt speziell

$$\lambda(q, \bar{q}, q', \bar{q}') = \delta(q - \bar{q}) \delta(q' - \bar{q}'). \quad (2.43)$$

2.5. Die reduzierte Dynamik

Nachdem wir die Präparation des Anfangszustands diskutiert haben, können wir daran gehen, dessen Zeitentwicklung zu untersuchen. Analog zu (2.18) ergibt sich für das Gesamtsystem

$$\begin{aligned} W(q_f, x_{n_f}, q'_f, x'_{n_f}, t) &= \int dq_i dq'_i dx_{n_i} dx'_{n_i} G(q_f, x_{n_f}, t; q_i, x_{n_i}, 0) \\ &\cdot W(q_i, x_{n_i}, q'_i, x'_{n_i}, 0) G^*(q'_f, x'_{n_f}, t; q'_i, x'_{n_i}, 0). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Die Dichtematrix W zur Zeit $t=0$ entspricht dabei der im letzten Abschnitt besprochenen Dichtematrix W_0 . Führt man für den Propagator G die Realzeitfunktionalintegraldarstellung ein, und drückt man die Anfangsdichtematrix durch die Präparationsfunktion und das Imaginärzeitfunktionalintegral für ρ_β gemäß (2.15) aus, so erhält man für die Dichtematrix W zur Zeit t das $3(N+1)$ -fache Funktionalintegral

$$\begin{aligned} W(q_f, x_{n_f}, q'_f, x'_{n_f}, t) &= \int dq_i dq'_i d\bar{q} d\bar{q}' dx_{n_i} dx'_{n_i} \lambda(q_i, \bar{q}, q'_i, \bar{q}') \\ &\cdot \frac{1}{Z_\beta} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}x_n \mathcal{D}q' \mathcal{D}x'_n \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}\bar{x}_n \\ &\cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S[q, x_n] - S[q', x'_n] \right) - \frac{1}{\hbar} S^E[\bar{q}, \bar{x}_n] \right]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Die Funktionalintegrale für $q(s)$, $x_n(s)$, $q'(s)$, $x'_n(s)$ gehen in Realzeit $0 \leq s \leq t$ und für $\bar{q}(\tau)$, $\bar{x}_n(\tau)$ in Imaginärzeit $0 \leq \tau \leq \hbar\beta$ über alle Funktionen, die die Randbedingungen

$$q(0) = q_i \quad q(t) = q_f$$

$$q'(0) = q'_i \quad q'(t) = q'_f$$

$$x_n(0) = x_{n_i} \quad x_n(t) = x_{n_f}$$

$$x'_n(0) = x'_{n_i} \quad x'_n(t) = x'_{n_f}$$

$$\bar{q}(0) = \bar{q}' \quad \bar{q}(\hbar\beta) = \bar{q}$$

$$\bar{x}_n(0) = x'_{n_i} \quad \bar{x}_n(\hbar\beta) = x_{n_i}$$

erfüllen, wobei der Index n über alle Oszillatoren des Bades läuft. Die Wege für die Badfreiheitsgrade gehen stetig vom Imaginärzeit- in den Realzeitanteil über, während die entsprechenden Wege für den Systemfreiheitsgrad im allgemeinen unstetig sind. Dies rührt von der Präparation her, die die Wege mittels der Präparationsfunktion λ verknüpft. Als Ausgangspunkt für die weitere Rechnung wollen wir noch die in (2.45) auftretenden Wirkungen zusammenstellen, die sich aus der Modell-Lagrangefunktion (2.20-23) ergeben:

$$\begin{aligned}
 S[q, x_n] &= \int_0^t ds \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2 - V(q, s) \right] \\
 &+ \int_0^t ds \sum_{n=1}^N \left[\frac{m_n}{2} \dot{x}_n^2 - \frac{m_n}{2} \omega_n^2 x_n^2 \right] \\
 &+ \int_0^t ds \sum_{n=1}^N \left[c_n q \dot{x}_n - q^2 \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \right]
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

$$\begin{aligned}
S^E[\bar{q}, \bar{x}_n] &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{\bar{q}}^2 + V(\bar{q}) \right) \\
&+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{n=1}^N \left(\frac{m_n}{2} \dot{\bar{x}}_n^2 + \frac{m_n}{2} \omega_n^2 \bar{x}_n^2 \right) \\
&+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{n=1}^N \left(-c_n \bar{q} \bar{x}_n + \bar{q}^2 \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \right)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Hier sieht man noch einmal deutlich den Effekt der Wick-Rotation, die insbesondere in (2.47) zu einer Bewegung im invertierten Potential führt. In der Wirkung (2.46) lassen wir eine zeitabhängige, äußere Kraft zu, während das Potential, in dem der Gleichgewichtszustand präpariert wird, zeitunabhängig sein soll.

Die Gleichungen (2.45-47) reichen aus, um die Dynamik des gesamten Systems für einen durch die Präparationsfunktion λ gegebenen Anfangszustand zu berechnen. Praktisch ist man jedoch gar nicht an so viel Information interessiert, sondern nur an der Dynamik des Systems, die durch die Zeitentwicklung der reduzierten Dichtematrix

$$\rho(q_f, q'_f, t) = \text{Sp}_B W(q_f, x_{n_f}, q'_f, x'_{n_f}, t) \tag{2.48}$$

beschrieben wird. Dabei wird über alle Badfreiheitsgrade gespurt. Das Ziel ist es nun, einen Ausdruck für die reduzierte Dichtematrix abzuleiten, in dem die Badvariablen nicht mehr auftreten. Das Vorgehen ist ganz analog zur Herleitung der effektiven Bewegungsgleichung (2.19), und wir erwarten wieder Zusatzterme, die den dissipativen Effekt des Wärmebades beschreiben. Der Ausdruck (2.48) läßt sich mit (2.45) umschreiben in

$$\rho(q_f, q'_f, t) = \int dq_i dq'_i d\bar{q} d\bar{q}' J(q_f, q'_f, t, q_i, q'_i, \bar{q}, \bar{q}') \lambda(q_i, \bar{q}, q'_i, \bar{q}'), \tag{2.49}$$

wobei λ die Anfangspräparation und die propagierende Funktion

$$J(q_f, q'_f, \tau, q_i, q'_i, \bar{q}, \bar{q}') = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}q' \mathcal{D}\bar{q} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_s[q] - S_s[q'] \right) - \frac{1}{\hbar} S_s^E[\bar{q}] \right] \cdot \tilde{F}[q, q', \bar{q}] \quad (2.50)$$

sowohl die Imaginärzeitdynamik, also die Darstellung der kanonischen Dichtematrix, als auch die Realzeitentwicklung der Zustände beschreibt. Das Influenzfunktional

$$\begin{aligned} \tilde{F}[q, q', \bar{q}] = & \int dx_{n_f} dx_{n_i} dx'_{n_i} \frac{1}{Z_B} \int \mathcal{D}x_n \mathcal{D}x'_n \mathcal{D}\bar{x}_n \\ & \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(S_B[x_n] + S_{SB}[q, x_n] - S_B[x'_n] - S_{SB}[q', x'_n] \right) \right. \\ & \left. - \frac{1}{\hbar} \left(S_B^E[\bar{x}_n] + S_{SB}^E[\bar{q}, \bar{x}_n] \right) \right] \end{aligned} \quad (2.51)$$

enthält die gesamte, relevante Information über das Bad. Der Normierungsfaktor $1/Z = Z_B/Z_\beta$ in (2.50) ergibt sich aus einer zweckmäßigen Aufspaltung der Zustandssumme Z_β des Gesamtsystems und deren Badanteil Z_B . Die Wirkung wurde in Bestandteile analog wie die Lagrangefunktion in (2.20) aufgeteilt. Ein Influenzfunktional wurde zum ersten Mal von Feynman und Vernon [12] für die faktorisierte Anfangsbedingung (2.38) angegeben. Im Falle unserer nichtfaktorisierten Anfangsbedingung ist die Auswertung aufwendiger, von der Konzeption her jedoch nicht schwieriger. Wie bereits bei der Herleitung der klassischen Bewegungsgleichung muß auch hier die Bewegung der einzelnen Badfreiheitsgrade in Abhängigkeit von einer zunächst beliebigen Kraft, ausgeübt von der Systemkoordinate, gelöst werden. Entsprechend ist das Influenzfunktional noch ein Funktional der Systemwege $q(s)$, $q'(s)$ und $\bar{q}(\tau)$. Da das Bad harmonisch ist und somit das Funktionalintegral Gaußform hat, und da außerdem die Badfreiheitsgrade untereinander nicht koppeln, können die $3N$ Funktionalintegrale in (2.51) exakt berechnet werden. Führt man anschließend den Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ durch, um ein dissipatives Bad zu erhalten, so findet man zunächst [25,26]

$$\tilde{F}[q, q', \bar{q}] = \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \Phi[q, q', \bar{q}]\right] \quad (2.52)$$

mit dem Exponenten

$$\begin{aligned} \Phi[q, q', \bar{q}] = & -\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma K(-i\tau+i\sigma)\bar{q}(\tau)\bar{q}(\sigma) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{1}{2}\mu\bar{q}^2(\tau) \\ & -i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} ds K^*(s-i\tau)\bar{q}(\tau)\{q(s)-q'(s)\} \\ & + \int_0^{\tau} ds \int_0^s du \{q(s)-q'(s)\}\{K(s-u)q(u)-K^*(s-u)q'(u)\} \\ & +i \int_0^{\tau} ds \frac{1}{2}\mu\{q^2(s)-q'^2(s)\}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Der Kern $K(\theta)$, der für komplexe Zeiten $\theta=s-i\tau$ und $0\leq\tau\leq\hbar\beta$ definiert ist, ist gegeben durch

$$K(\theta) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} I(\omega) \frac{\cosh\left[\omega\left(\frac{1}{2}\hbar\beta-i\theta\right)\right]}{\sinh\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\beta\right)} \quad (2.54)$$

und die Konstante μ ist

$$\mu = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} I(\omega) \frac{2}{\omega}. \quad (2.55)$$

Das Influenzfunktional ist also vollständig durch die spektrale Bad-dichte und damit durch den klassischen Dämpfungskern bestimmt, wie wir es bereits in Abschnitt 2.3. erwartet haben. Alle Terme in Φ gehen für

verschwindende Dämpfung gegen Null, so daß in diesem Fall $\tilde{F}=1$ wird. Dann bleibt nur noch der Systemanteil in (2.50) übrig, wie es für das System, das nicht an ein Bad gekoppelt ist, auch sein muß.

Die in (2.53) angegebene Form des Exponenten des Influenzfunctionals enthält noch lokale Anteile, die keine dissipative Wirkung haben, sondern das Potential renormieren. Diese Potentialrenormierung hatten wir bereits bei der Aufstellung unseres Modells in (2.23) berücksichtigt. Demzufolge sollten sich die zu μ proportionalen Terme gerade mit den lokalen Anteilen der Terme, die den Kern K enthalten, wegheben. Dies ist in der Tat der Fall [25,26]. Wir wollen auf die Details der Rechnung hier nicht eingehen. Um das Endergebnis jedoch in einer geeigneten Form schreiben zu können, müssen wir noch den Integralkern $k(\tau)$ einführen, der den nichtlokalen Anteil des Imaginärzeitkerns $K(i\tau)$ repräsentiert. Da uns der Kern nur im Intervall $0 \leq \tau \leq \hbar\beta$ interessiert, können wir ihn in eine Fourierreihe entwickeln, in der die für die Temperatur charakteristischen Matsubara-Frequenzen

$$\nu_n = \frac{2\pi}{\hbar\beta} n \quad (2.56)$$

auftreten. Wir erhalten

$$k(\tau) = \frac{M}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \zeta_n \exp(i\nu_n \tau), \quad (2.57)$$

wobei die Fourierkomponenten ζ_n durch die Laplace-Transformierte des Dämpfungskerns gemäß

$$\zeta_n = |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|) \quad (2.58)$$

bestimmt sind. Des weiteren ist es praktisch, in den Realzeitwegen zu Summen- und Differenzkoordinaten

$$r = \frac{q+q'}{2} \quad x = q-q' \quad (2.59)$$

überzugehen, wobei diese Beziehungen auch für die Randwerte der Wege An-

wendung finden. Als Ergebnis erhalten wir schließlich für die Dichtematrix

$$\rho(x_f, r_f, t) = \int dx_i dr_i d\bar{q}d\bar{q}' J(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{q}, \bar{q}') \lambda(x_i, r_i, \bar{q}, \bar{q}') \quad (2.60)$$

mit der propagierenden Funktion

$$J(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{q}, \bar{q}') = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x \mathcal{D}r \mathcal{D}\bar{q} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \Sigma[x, r, \bar{q}]\right]. \quad (2.61)$$

Dabei ist die effektive Wirkung gegeben durch

$$\begin{aligned} \Sigma[x, r, \bar{q}] = & i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\bar{q}}^2 + V(\bar{q}) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau - \sigma) \bar{q}(\tau) \bar{q}(\sigma) \right] \\ & + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^t ds K^*(s - i\tau) \bar{q}(\tau) x(s) \\ & + \int_0^t ds \left[m\dot{x}r - V(r + \frac{x}{2}, s) + V(r - \frac{x}{2}, s) - Mr_1 \gamma(s) x(s) \right. \\ & \left. - M \int_0^s du \gamma(s-u) x(s) \dot{r}(u) + \frac{i}{2} \int_0^t du K'(s-u) x(s) x(u) \right], \end{aligned} \quad (2.62)$$

die aus dem Systemanteil der Wirkung wie in (2.50) und den nichtlokalen Anteilen des Influenzfunctionals besteht. Der erste Anteil in Σ beschreibt den Imaginärzeitanteil, während der dritte Term den Feynman-Vernon-Anteil für die Realzeitentwicklung enthält. Der zweite Term, der die Imaginär- und Realzeitwege koppelt, ist für die Berücksichtigung der anfänglichen Korrelationen zwischen System und Bad zuständig. Aus (2.62) erhält man durch Variation nach x , r und \bar{q} bei festgehaltenen Randwerten die Bewegungsgleichungen

$$M\ddot{\bar{q}} - \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau - \sigma) \bar{q}(\sigma) - \frac{dV(\bar{q})}{d\bar{q}} = -i \int_0^t ds K^*(s - i\tau) x(s), \quad (2.63)$$

$$M\ddot{r} + M\frac{d}{ds} \int_0^s du \gamma(s-u)r(u) + \frac{1}{2} \frac{d}{dr} \left[V(r+\frac{x}{2}, s) + V(r-\frac{x}{2}, s) \right] =$$

$$i \int_0^t du K'(s-u)x(u) + \int_0^{\hbar\beta} d\tau K^*(s-i\tau)\bar{q}(\tau) \quad (2.64)$$

und

$$M\ddot{x} - M\frac{d}{ds} \int_s^t du \gamma(u-s)x(u) + 2 \frac{d}{dx} \left[V(r+\frac{x}{2}, s) + V(r-\frac{x}{2}, s) \right] = 0, \quad (2.65)$$

die die Wirkung Σ extremalisieren und den Ausgangspunkt für die spätere Realzeitrechnung bilden werden. Man kann zeigen [25], daß im klassischen Limes $x(s)=0$ ist und (2.64) als homogene Gleichung überlebt. Damit ist die Verbindung zu der klassischen Gleichung (2.19) hergestellt.

Die entsprechenden Ausdrücke für Imaginärzeitrechnungen lassen sich leicht aus diesen Ergebnissen herleiten. Die kanonische Dichtematrix läßt sich aus (2.60) erhalten, indem man die Realzeitentwicklung unberücksichtigt läßt und für die Präparationsfunktion den Ausdruck (2.43) einsetzt. Man erhält dann

$$\rho_\beta(q, q') = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{q} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{M}{2} \dot{\bar{q}}^2 + V(\bar{q}) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau-\sigma)\bar{q}(\tau)\bar{q}(\sigma) \right) \right] \quad (2.66)$$

mit den Randbedingungen $\bar{q}(0)=q'$ und $\bar{q}(\hbar\beta)=q$. Die Bewegungsgleichung, die die Wirkung extremalisiert, lautet jetzt

$$M\ddot{\bar{q}} - \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau-\sigma)\bar{q}(\sigma) - \frac{dV(\bar{q})}{d\bar{q}} = 0. \quad (2.67)$$

Diese Gleichung ist genau die Realzeitgleichung (2.63) für $t=0$ und zu-

gleich die klassische Bewegungsgleichung (2.19) im invertierten Potential.

Mit diesen Gleichungen haben wir alles, was wir für die Imaginär- und Realzeitrechnungen in den Kapiteln 3-6 benötigen. Weitere Schritte werden erst möglich, nachdem das Potential V näher spezifiziert ist.

3. Zerfall metastabiler Zustände

Die Zerfallsrate eines Zustands in einem metastabilen Potential wird mit Imaginärzeitfunktionalintegralmethoden berechnet. Zwei Mechanismen sind für den Zerfall verantwortlich, das thermische Hüpfen und das quantenmechanische Tunneln. In diesem Kapitel wollen wir uns auf den Bereich höherer Temperaturen beschränken, in dem das Hüpfen dominiert, zusätzlich aber auch Quantenkorrekturen auftreten. Besondere Beachtung wird dabei der Auswirkung von Dämpfung mit Gedächtnis auf die Zerfallsrate geschenkt.

3.1. Thermisches Hüpfen und quantenmechanisches Tunneln

Der Zerfall metastabiler Zustände und kinetische Prozesse, bei denen eine Barriere zu überwinden ist, sind ein weitverbreitetes Phänomen in der Physik sowie deren Nachbarwissenschaften. Im klassischen Bild liegt ein Teilchen im lokalen Potentialminimum, das durch eine Barriere der Höhe V_b von einem Bereich getrennt ist, in dem das Teilchen eine kleinere potentielle Energie hätte. Zunächst ist ein Entweichen des Teilchens

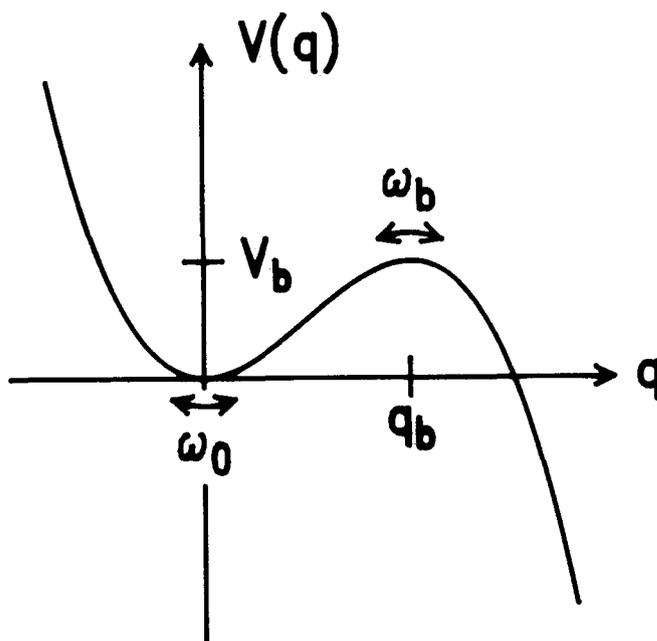


Abb. 2: Metastabiles Potential mit Mulde bei $q=0$ und Barriere bei $q=q_b$. Wichtige Potentialparameter sind die Barrierehöhe V_b und die Frequenzen für kleine Oszillationen um die Mulde ω_0 und die Barriere ω_b .

aus dem lokalen Minimum nicht möglich. Ist dieses System jedoch an ein Wärmebad gekoppelt, so kann dem Teilchen Aktivierungsenergie zugeführt werden, und dieses kann die Barriere überwinden. Diesen Mechanismus bezeichnet man als thermisches Hüpfen. Die Zerfallsrate Γ bei der Temperatur T ist dann gegeben durch das Arrhenius-Gesetz [13]

$$\Gamma = A \exp(-V_b/k_B T). \quad (3.1)$$

Die Rate wird also mit zunehmender Barrierenhöhe und abnehmender Temperatur kleiner. Der Vorfaktor A wird häufig als die Anlauffrequenz interpretiert, mit der das Teilchen versucht, die Barriere zu überwinden. Er hängt jedoch eher mit den Eigenschaften der Gleichgewichtsverteilung im Potential zusammen. Eine Ableitung der Arrhenius-Formel wurde 1940 von Kramers [15] gegeben. Diese wird im Kapitel 6 genauer diskutiert. In (3.1) haben wir implizit angenommen, daß der Zerfall durch eine zeitunabhängige Rate Γ beschrieben wird, wobei diese Rate die exponentielle Abnahme der Besetzung in der Potentialmulde beschreibt. Für die weiteren Betrachtungen wollen wir davon ausgehen, daß diese Annahme über lange, uns interessierende Zeiträume zutreffend ist, obwohl davon auszugehen ist, daß zumindest für sehr kurze und sehr lange Zeiten Abweichungen auftreten. Solche Effekte können jedoch im Rahmen einer Imaginärzeitrechnung nicht beschrieben werden. Wir müssen vielmehr davon ausgehen, daß die Verteilung in der Mulde immer im Gleichgewicht ist. Dazu muß die Ankopplung an das Wärmebad stark genug sein, und daraus folgt, daß die Dämpfung nicht zu schwach sein darf. Des weiteren wollen wir fordern, daß die Barrierenhöhe groß gegenüber den übrigen Systemfrequenzen ist. Es soll also

$$V_b \gg \hbar\omega_0, \quad V_b \gg \hbar\omega_b$$

gelten. Diese Bedingung sorgt dafür, daß der metastabile Zustand langsam zerfällt und trägt damit dazu bei, daß keine starke Störung der Gleichgewichtsverteilung in der Mulde stattfindet. Außerdem gewährleistet sie die Anwendbarkeit der semiklassischen Näherung (2.10). Die Abgrenzung gegenüber dem Bereich, in dem Quanteneffekte dominieren, und dem Bereich, in dem Nichtgleichgewichtseffekte eine Rolle spielen, wurde von Hänggi [39] im Thomas-Diagramm dargestellt.

In der klassischen Theorie wird die Zerfallsrate bei tieferen Temperaturen sehr schnell klein. Dann wird ein zweiter Mechanismus dominierend. Die Quantenmechanik erlaubt das Tunneln durch die Barriere. Dieser Effekt tritt auch bei Abwesenheit eines Wärmebades auf, wird jedoch durch dessen Anwesenheit modifiziert. Falls das System nicht an Badfreiheitsgrade gekoppelt ist, wird die Zerfallsrate in semiklassischer Näherung durch die WKB-Formel [14]

$$\Gamma = B \exp\left(-\frac{S_{\text{Barr}}}{\hbar}\right) \quad (3.2)$$

gegeben. Die Tunnelwahrscheinlichkeit wird hier durch die Wirkung S_{Barr} bestimmt, die zu einem periodischen Weg unter der Barriere gehört.

Abhängig von der Temperatur wird also der Zerfall eines metastabilen Zustands entweder vom thermischen Hüpfen oder vom quantenmechanischen Tunneln dominiert. Es zeigt sich, daß es eine scharf definierte Übergangstemperatur T_0 , die sogenannte crossover-Temperatur, gibt, bei der der Übergang von einem Regime in das andere stattfindet. In der Rechnung

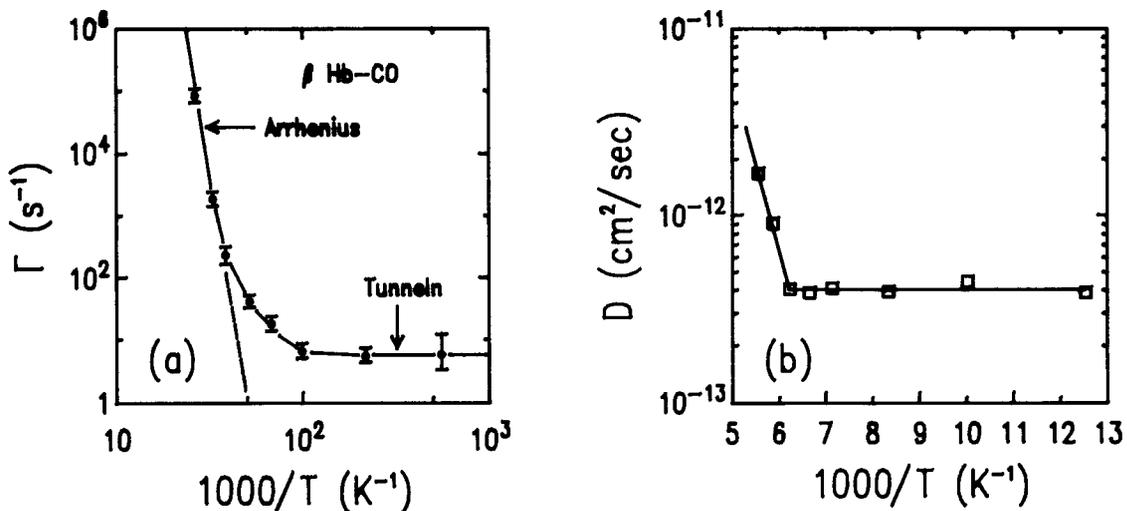


Abb. 3: Experimentelle Resultate zum Übergang vom thermischen Hüpfen zum quantenmechanischen Tunneln.

- a. Reaktionsrate für das Anlagern von Kohlenmonoxid an die β -Kette von Hämoglobin (Daten nach [40])
- b. Diffusionskonstante von Wasserstoff auf der (110)-Ebene von Wolfram bei einer relativen Bedeckung von 0,1 (Daten nach [17])

zeigt sich dies am Auftreten einer neuen stationären Lösung, der Bounce, die mit dem Tunneln in Verbindung gebracht wird [41]. Experimentell sieht man in einer Arrhenius-Auftragung ein Abknicken bei T_0 . Der Wert der crossover-Temperatur hängt dabei sehr von den Systemparametern ab. Beim Zerfall des spannungslosen Zustands eines Josephsonkontakts liegt sie bei etwa 100 mK, bei der Diffusion von Wasserstoff auf Wolfram kann sie 150 K betragen.

Wir wollen uns im folgenden mit der Frage beschäftigen, wie die crossover-Temperatur durch die dissipativen Einflüsse des Bades verändert wird und wie die Arrhenius-Rate (3.1) durch Quantenkorrekturen modifiziert wird. Wir beschränken uns also auf Temperaturen, die größer als T_0 sind, da dann nur lokale Eigenschaften der Mulde und der Barriere eine Rolle spielen. Unterhalb von T_0 muß die Anharmonizität des Potentials berücksichtigt werden, da es sich bei der Bounce um eine Lösung handelt, die große Bereiche des Potentials durchläuft. Für eine ausführliche Diskussion dieses Regimes verweisen wir auf die Arbeiten von Grabert, Olschowski und Weiß [42].

3.2. Bestimmung der crossover-Temperatur

Zur Berechnung der Zerfallsrate in Imaginärzeit muß die Zustandssumme

$$Z_\beta = \oint \mathcal{D}q \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{\text{eff}}[q]\right) \quad (3.3)$$

bestimmt werden, wobei das Funktionalintegral über alle in einem Intervall der Länge $\hbar\beta$ periodischen Funktionen zu nehmen ist. Dies ist eine Konsequenz der Spurbildung in (2.13). Die effektive Wirkung

$$S_{\text{eff}} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2 + V(q) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau-\sigma) q(\tau) q(\sigma) \right] \quad (3.4)$$

ist die Wirkung, die wir in (2.66) durch Elimination des Bades erhalten haben. Wenn wir die Zustandssumme in semiklassischer Näherung ausrechnen wollen, dann müssen wir als erstes die Funktionen q_{c1} aus dem Raum der $\hbar\beta$ -periodischen Funktionen suchen, für die die Wirkung $S_{\text{eff}}[q]$

extremal wird. Des weiteren sind nach (2.10) die Fluktuationen $\xi(\tau)$ um die extremalen Wege in quadratischer Ordnung zu berücksichtigen. Die zweite Variation der Wirkung ist der lineare Operator

$$L(q_{cl}, \tau, \sigma) = \frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta q(\tau) \delta q(\sigma)} \Big|_{q_{cl}} = -M\ddot{\delta}(\tau-\sigma) + V''(q_{cl})\delta(\tau-\sigma) + k(\tau-\sigma). \quad (3.5)$$

Der zugehörige Beitrag zur Wirkung ist

$$S_2 = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \xi(\tau) \xi(\sigma) L(q_{cl}, \tau, \sigma) \quad (3.6)$$

und besonders leicht auszuwerten, wenn man die Fluktuationen nach dem zu L gehörigen vollständigen Orthonormalsystem entwickelt.

Bei hohen Temperaturen suchen wir Lösungen der Bewegungsgleichung (2.67), wobei die Periode $\hbar\beta$ dieser Lösung klein ist. Es gibt dann nur zwei Lösungen, nämlich

$$q_{cl,1}(\tau) = 0 \quad (3.7)$$

und

$$q_{cl,2}(\tau) = q_b. \quad (3.8)$$

Im ersten Fall sitzt das Teilchen in der Mulde des nichtinvertierten Potentials, im zweiten Fall sitzt es auf der Barriere. Eine oszillierende Lösung ist bei hohen Temperaturen nicht möglich. Nähert man das Potential für kleine Auslenkungen, so sieht man daß die Temperatur, unterhalb der im ungedämpften Fall eine periodische Lösung möglich ist, durch die Oszillationsfrequenz um das Minimum des invertierten Potentials gegeben ist.

Die Wirkungen, die zu den Lösungen (3.7) und (3.8) gehören, lassen sich leicht bestimmen. Man erhält

$$S_{eff}[q_{cl,1}(\tau)] = S_0 = 0 \quad (3.9)$$

und

$$S_{\text{eff}}[q_{c1,2}(\tau)] = S_b = \hbar\beta V_b. \quad (3.10)$$

Die Indizes 0 und b sollen andeuten, daß es sich um eine Größe handelt, die auf die Mulde bzw. die Barriere bezogen ist. Die Resultate (3.9) und (3.10) hängen nicht von der Dämpfung ab, da nach (2.57) und (2.58) das Integral über den Kern $k(\tau)$ verschwindet. Um die Natur der Extrema der Wirkung näher zu bestimmen, betrachten wir die Fluktuationen um die stationären Punkte. Zur Entwicklung der Fluktuationen verwenden wir den vollständigen Satz der Exponentialfunktionen

$$\phi_n(t) = \exp(i\nu_n t). \quad (3.11)$$

Durch Einsetzen in (3.5) findet man, daß die ϕ_n Eigenfunktionen zu L_0 mit dem Eigenwert

$$\lambda_n^0 = M \left[\nu_n^2 + |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|) + \omega_0^2 \right] \quad (3.12)$$

sind, wobei

$$\omega_0^2 = \frac{1}{M} V''(0) \quad (3.13)$$

die Frequenz kleiner Oszillationen in der Mulde bestimmt. Da alle Eigenwerte λ_n^0 positiv sind, handelt es sich beim stationären Punkt $q_{c1,1}$ also um ein lokales Minimum. Die ϕ_n sind auch Eigenfunktionen zu L_b und zwar mit den Eigenwerten

$$\lambda_n^b = M \left[\nu_n^2 + |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|) - \omega_b^2 \right] \quad (3.14)$$

mit

$$\omega_b^2 = -\frac{1}{M} V''(0). \quad (3.15)$$

Bei hohen Temperaturen gibt es hier neben unendlich vielen positiven Eigenwerten auch den negativen Eigenwert λ_0^b . Bei $q_{c1,2}$ handelt es sich demnach um einen Sattelpunkt. Dies ist nicht sehr überraschend, sondern vielmehr eine Folge der Metastabilität des Potentials. Erniedrigt man die Temperatur, so erreicht man bei der Temperatur T_0 den Punkt, wo die Eigenwerte λ_1^b und λ_{-1}^b verschwinden. Dies hängt mit dem Auftreten eines weiteren stationären Punktes der Wirkung, nämlich der Bounce, zusammen. Die Bounce ist eine periodische Lösung im invertierten Potential, die ausgehend von $q=0$ über die Barriere und wieder zurück läuft und nach der Zeit $\hbar\beta$ wieder $q=0$ erreicht. Die Bedingung, daß λ_1^b verschwindet, definiert uns also die crossover-Temperatur

$$T_0 = \frac{\hbar\omega_R}{2\pi k_B}, \quad (3.16)$$

wobei die Frequenz ω_R die positive Lösung der Gleichung

$$\omega_R^2 + \omega_R \hat{\gamma}(\omega_R) = \omega_b^2 \quad (3.17)$$

ist. Für verschwindende Dämpfung erhält man sofort, daß die crossover-Temperatur, wie oben diskutiert, durch die Oszillationsfrequenz an der Barriere gegeben ist. Für den Fall ohmscher Dämpfung ist (3.17) eine quadratische Gleichung, die sich leicht lösen läßt. Man erhält

$$T_0 = \frac{\hbar}{2\pi k_B} \left(\left(\omega_b^2 + \frac{\gamma^2}{4} \right)^{1/2} - \frac{\gamma}{2} \right). \quad (3.18)$$

Die crossover-Temperatur wird also durch Dissipation erniedrigt und somit das Regime, in dem thermisches Hüpfen dominiert, ausgedehnt.

3.3. Berechnung der Zerfallsrate

Wir können uns jetzt an die Auswertung der Zustandssumme machen. Da wir dies in semiklassischer Näherung für Temperaturen oberhalb der crossover-Temperatur tun wollen, setzt sich die Zustandssumme

$$Z_\beta = Z_0 + Z_b \quad (3.19)$$

aus den Beiträgen der beiden stationären Punkte (3.7) und (3.8) zusam-

men. Die einzelnen Beiträge wiederum sind durch die klassische Wirkung nach (3.9) und (3.10) sowie den Beitrag der Fluktuationen bestimmt. Wenn wir die Fluktuationen nach dem Orthonormalsystem (3.11) gemäß

$$\xi(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n \phi_n(\tau) \quad (3.20)$$

entwickeln, so werden aus dem Funktionalintegral über die $\xi(\tau)$ unendlich viele gewöhnliche Gaußintegrale über die Entwicklungskoeffizienten a_n . Diese können für den Beitrag des ersten stationären Punktes leicht ausgewertet werden, und wir erhalten

$$Z_0 = N \left(\prod_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda_n^0 \right)^{-1/2}. \quad (3.21)$$

Der Vorfaktor N enthält unter anderem die Funktionaldeterminante, die vom Übergang vom Funktionalintegral zu den gewöhnlichen Integralen herührt. Außerdem regularisiert er das divergierende Produkt über die Eigenwerte λ_n^0 . Da der Faktor N aber auch in Z_b auftritt und letztlich für die Berechnung der Zerfallsrate nicht von Bedeutung ist, wollen wir ihn hier nicht näher bestimmen.

Die Berechnung von Z_b ist zunächst nicht möglich, da der Eigenwert λ_0^b negativ ist und somit das Integral über den zugehörigen Entwicklungskoeffizienten nicht existiert. Dies hängt natürlich wieder damit zusammen, daß wir die Zustandssumme eines instabilen Systems berechnen wollen. An dieser Stelle behilft man sich mit einer analytischen Fortsetzung des Integrals. Dabei bekommt die Zustandssumme und auch die freie Energie einen Imaginärteil. Der Imaginärteil der freien Energie F ist eine Folge der Instabilität des Systems und hängt, wie von Affleck [21] gezeigt wurde, mit der Zerfallsrate

$$\Gamma = -\frac{2}{\hbar} \frac{T_0}{T} \text{Im}(F) \quad T \geq T_0 \quad (3.22)$$

zusammen. Die analytische Fortsetzung erfolgt nach einer Vorschrift von

Langer [20,41], nach der am stationären Punkt in Richtung des steilsten Abfalls zu integrieren ist. Es sei angemerkt, daß noch nicht bewiesen wurde, daß diese Methode auf dissipative Systeme tatsächlich anwendbar ist. Diese Unsicherheit motiviert teilweise unsere Realzeitrechnung der Barrierendynamik in Kapitel 6.

Die einzige Fluktuationsmode, bei der sich gegenüber der Berechnung von Z_0 etwas ändert, ist ϕ_0 . Lokal von der Barriere aus betrachtet ist diese Mode in beiden Richtungen instabil. Da jedoch auf der linken Seite die Potentialmulde liegt, ist diese Seite nicht kritisch. Der entsprechende Beitrag zum Integral, der von der genauen Form des Potentials abhängen würde, muß nicht berechnet werden, da der Realteil von Z_b für die Zerfallsrate nicht von Bedeutung ist. Auf der rechten Seite der Barriere muß nun aber über den Entwicklungskoeffizienten a_0 auf der positiven imaginären Achse von 0 bis $+\infty$ integriert werden. Man erhält so für den Imaginärteil von Z_b

$$\text{Im}(Z_b) = \frac{1}{2} N \left(- \prod_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda_n^b \right)^{-1/2} \exp(-\beta V_b). \quad (3.23)$$

Man beachte, daß dieser Beitrag im Vergleich zu Z_0 exponentiell klein ist. Dies ist jedoch nicht im Widerspruch zur semiklassischen Näherung, da es sich bei (3.23) um die führende Ordnung des Imaginärteils handelt. Dieser soll gerade klein sein, da sonst der metastabile Zustand sehr schnell zerfällt und eine Rechnung, die einen quasistationären Zustand annimmt, gar nicht zulässig wäre. Durch Einsetzen von (3.23) und (3.21) in (3.22) erhält man nun leicht die Zerfallsrate. Um den Einfluß der Quantenkorrekturen zu verdeutlichen, führen wir einen Faktor f_Q ein, der die Abweichung vom klassischen Resultat beschreibt. Das Ergebnis lautet dann

$$\Gamma = f_Q \cdot \Gamma_{c1} = f_Q \cdot \frac{\omega_0}{2\pi} \frac{\omega_R}{\omega_b} \exp(-\beta V_b) \quad (3.24)$$

mit

$$f_Q = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2 + \nu_n \hat{\gamma}(\nu_n) + \omega_0^2}{\nu_n^2 + \nu_n \hat{\gamma}(\nu_n) - \omega_b^2}. \quad (3.25)$$

Für hohe Temperaturen dominieren in f_Q die ν_n^2 -Anteile und f_Q geht im klassischen Limes gegen Eins. Wir erhalten dann also tatsächlich das Arrhenius-Resultat (3.1). Durch die Rechnung wurde auch der Vorfaktor A bestimmt, in den unter anderem die crossover-Temperatur über die Frequenz ω_R eingeht.

Nähert man sich der crossover-Temperatur von oben, so divergiert der Quantenkorrekturfaktor f_Q . Dies hängt damit zusammen, daß die Eigenwerte der Fluktuationsmoden ϕ_1 und ϕ_{-1} sehr klein werden und daher die Näherung des steilsten Abfalls schlecht wird, weil die Gaußfunktion der Entwicklungskoeffizienten a_1 und a_{-1} sehr breit wird. Das Ergebnis läßt sich regularisieren, wenn man Terme höherer Ordnung mitnimmt [43]. Hier deutet sich schon an, daß man unterhalb von T_0 in einen Bereich kommt, in dem die Anharmonizität des Potentials eine wichtige Rolle spielt.

Wir wollen uns jetzt wieder höheren Temperaturen zuwenden und die führenden Korrekturen zum klassischen Arrhenius-Gesetz untersuchen. Bringt man das Produkt (3.25) in den Exponenten und entwickelt man die dabei entstehende Summe in führender Ordnung für hohe Temperaturen, so ergibt sich [44]

$$\Gamma = \frac{\omega_0}{2\pi} \frac{\omega_R}{\omega_b} \exp \left[-\frac{V_b}{k_B T} + \frac{\hbar^2}{24} \frac{\omega_0^2 + \omega_b^2}{(k_B T)^2} + O(T^{-4}) \right]. \quad (3.26)$$

Wir stellen fest, daß Dissipation in diesem Resultat nur über die renormierte Frequenz ω_R auftritt, also den Vorfaktor beeinflusst, nicht jedoch den Exponenten. Die führende Korrektur im Exponenten hängt nur von den Potentialparametern ω_0 in der Mulde und ω_b an der Barriere ab. Daher sollte man mit Hilfe dieser Entwicklung in der Lage sein, aus Messungen der Zerfallsrate wertvolle Schlüsse über das vorliegende, metastabile Potential zu ziehen. Der Beitrag von der Barriere ist seit langem bekannt aus Rechnungen zum Tunneln durch eine parabolische Barriere [45] ohne Dissipation. Der Beitrag der Mulde läßt sich auf die Temperaturabhängigkeit der Verteilung des Anfangszustands zurückführen.

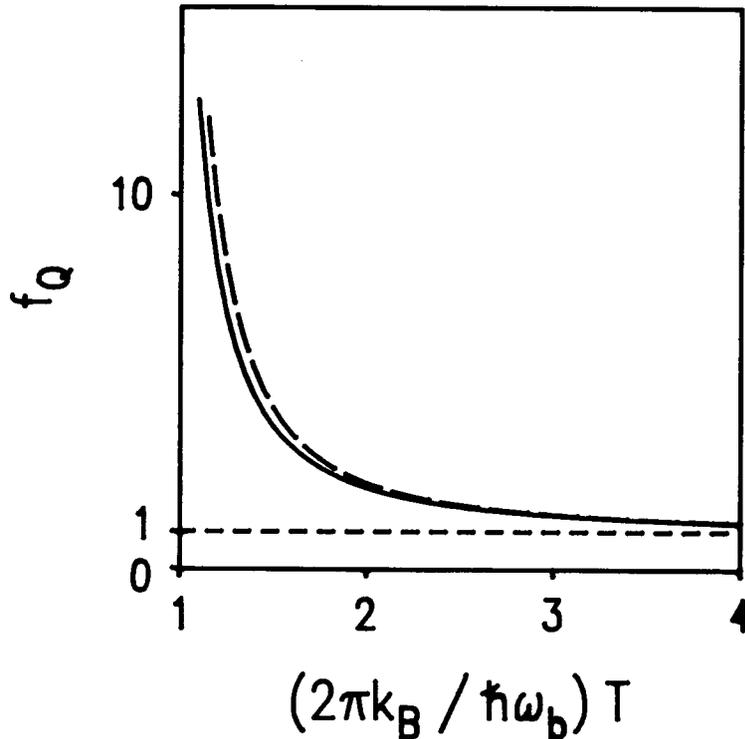


Abb. 4: Vergleich des exakten Quantenkorrekturfaktors f_Q nach (3.25) (durchgezogene Linie) mit der Näherung (3.26) (gestrichelte Linie) für $\omega_b = \omega_0$ und das Rubin-Modell mit $\gamma_0/\omega_b = 1/2$ und $\omega_b \tau_c = 1/2$. T_0 ist in diesen Einheiten etwa 0,85.

Natürlich kann man die Entwicklung von f_Q zu höheren Ordnungen fortsetzen. Dabei stellt man jedoch fest, daß diese Näherungen nicht wesentlich besser sind, als die Gleichung (3.26), die das Verhalten der Zerfallsrate in einem sehr weiten Temperaturbereich richtig beschreibt. Für praktische Zwecke ist (3.26) daher am geeignetsten. Abbildung 4 zeigt die Näherung für eine mittlere Dämpfung und relativ kurzes Gedächtnis. Man findet auch bei starker Abweichung von der klassischen Rate gute Übereinstimmung, die noch erheblich besser wird, wenn man die Dämpfung verringert und die Gedächtniskorrelationszeit vergrößert. Führt man die Entwicklung für höhere Ordnungen durch, so findet man, daß die weiteren Terme von Dissipation beeinflusst werden. Dabei gehen wesentlich die Laplace-Transformierte $\hat{\gamma}$ des Dämpfungskerns und deren Ableitungen im Unendlichen ein. Interessanterweise tritt im Spezialfall rein ohmscher Dämpfung ein Term der Ordnung T^{-3} auf, der damit zusammenhängt, daß $\hat{\gamma}(\infty)$

in diesem Fall endlich bleibt. Für jedes realistische Modell verschwindet jedoch $\hat{\gamma}(\infty)$, so daß Korrekturen zu (3.26) tatsächlich von vierter Ordnung sind. Dieses Beispiel verdeutlicht, daß es Fälle gibt, in denen der Grenzübergang Gedächtniszeit gegen Null nicht auf das rein ohmsche Resultat führt. Allerdings beschreibt dieser Grenzübergang den Fall ohmscher Dämpfung mit Hochfrequenzabschneiden, der physikalisch relevanter ist.

Die experimentelle Verifikation des Quantenkorrekturfaktors (3.25) gelang mit guter Signifikanz erst in jüngster Zeit, da es dazu notwendig ist, die Systemparameter unabhängig voneinander genau zu bestimmen. Cleland, Martinis und Clarke [46] benutzten zu diesem Zweck einen Josephsonkontakt, der so präpariert war, daß er in sehr guter Näherung durch das sogenannte RSJ-Modell, das wir im nächsten Kapitel ausführlicher diskutieren werden, beschrieben wird. Wir wollen jetzt nur bemerken, daß im Experiment parallel zum Josephsonkontakt ein zusätzlicher Widerstand angebracht war, der zu Dissipation führt. Wird dem System von außen ein Strom aufgeprägt, so besteht eine Analogie zu einem Brownschen Teilchen in einem gekippten "Waschbrett"-Potential [4], auf das unsere Überlegungen zum metastabilen Potential angewendet werden können. Im Experiment wurden für Temperaturen $T_0 < T < 3T_0$ deutliche Abweichungen von der klassischen Rate festgestellt. Die beobachtete Rate war dabei in sehr guter Übereinstimmung mit den Vorhersagen der Theorie für ohmsche Dämpfung (Fig. 3 in [46], entspricht der Auftragung in unserer Abbildung 4). Unterhalb der crossover-Temperatur wurde die dort anzuwendende Tieftemperatur-Theorie bestätigt.

3.4. Einfluß von Gedächtniseffekten auf die Zerfallsrate

Wir wollen jetzt den Einfluß von Gedächtniseffekten betrachten. Vor allem in chemischen Systemen sind sowohl die Barrierenfrequenz ω_b als auch die inverse Korrelationszeit der vom Bad ausgeübten Kräfte von der Größenordnung von $10^{12} - 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Man darf dann im allgemeinen nicht mehr $\hat{\gamma}(\omega)$ in ohmscher Näherung durch $\hat{\gamma}(0)$ ersetzen, da der Dämpfungskern bei den relevanten Frequenzen deutlich vom statischen Wert abweichen kann.

Wie wir bei der Diskussion der Zerfallsrate (3.26) gesehen haben, beeinflußt Dissipation und eventuell damit verbundenes Gedächtnis bei höheren Temperaturen nur den Vorfaktor. Da diese Abhängigkeit durch das Verhalten der crossover-Temperatur T_0 bestimmt ist, wenden wir uns jetzt

der Untersuchung von T_0 für Dissipationsmechanismen mit Gedächtnis zu. Gleichzeitig werden wir dabei lernen, wie sich die Grenze zwischen den Bereichen in denen thermisches Hüpfen bzw. quantenmechanisches Tunneln dominieren, in Abhängigkeit von der Gedächtniskorrelationszeit τ_c verschiebt. Als Beispiele wollen wir das Drude- und das Rubin-Modell verwenden, die wir in Abschnitt 2.3. eingeführt haben.

Wenn wir die crossover-Temperatur T_0 , oder nach (3.16) damit gleichbedeutend die renormierte Frequenz ω_R , bestimmen wollen, müssen wir die positive Wurzel der Gleichung (3.17) suchen. Dazu benötigen wir die Laplace-Transformierte $\hat{\gamma}(z)$ des Dämpfungskerns. Aus dem Dämpfungskern $\gamma(t)$ erhält man sofort für das Drude-Modell mit (2.31)

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{\gamma\omega_D}{z + \omega_D} \quad (3.27)$$

und mit (2.32) für das Rubin-Modell

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{v\omega_L^2}{z + \sqrt{z^2 + \omega_L^2}}. \quad (3.28)$$

Man überprüft leicht, daß für verschwindende Gedächtniskorrelationszeit $\tau_c \rightarrow 0$, also $\omega_D \rightarrow \infty$ im Drude-Modell und $\omega_L \rightarrow \infty$ im Rubin-Modell, beide Modelle auf den Fall ohmscher Dämpfung mit der durch (2.34) definierten Dämpfungsstärke führen.

Während die Bestimmung der crossover-Temperatur für das Drude-Modell auf eine Gleichung dritten Grades führt, die zweckmäßig auf dem Computer gelöst wird, läßt sich das Ergebnis für das Rubin-Modell in geschlossener Form angeben. Man erhält [44]

$$\frac{\omega_R}{\omega_b} = \begin{cases} \left[\frac{(1-v) + \kappa^2/2 - [v^2 + \kappa^2(1-v) + \kappa^4/4]^{1/2}}{1-2v} \right]^{1/2} & v \neq \frac{1}{2} \\ (1 + \kappa^2)^{-1/2} & v = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.29)$$

mit

$$\kappa = \frac{v\omega_L}{\omega_b}. \quad (3.30)$$

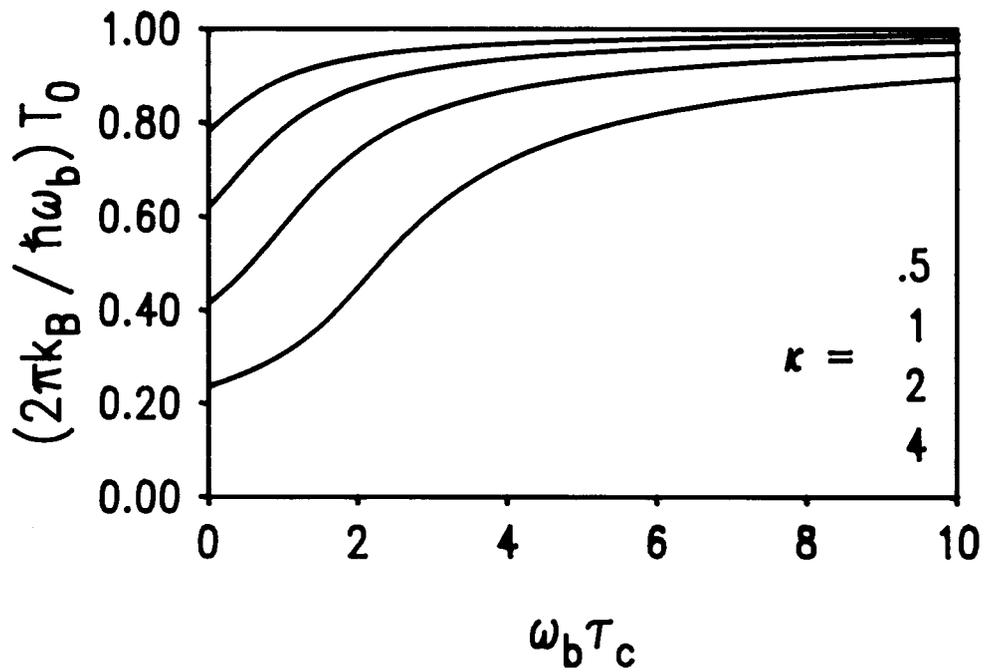


Abb. 5a: Abhängigkeit der crossover-Temperatur von der Gedächtniskorrelationszeit τ_c für das Rubin-Modell mit verschiedenen Dämpfungstärken $\kappa = \gamma_0 / \omega_b$.

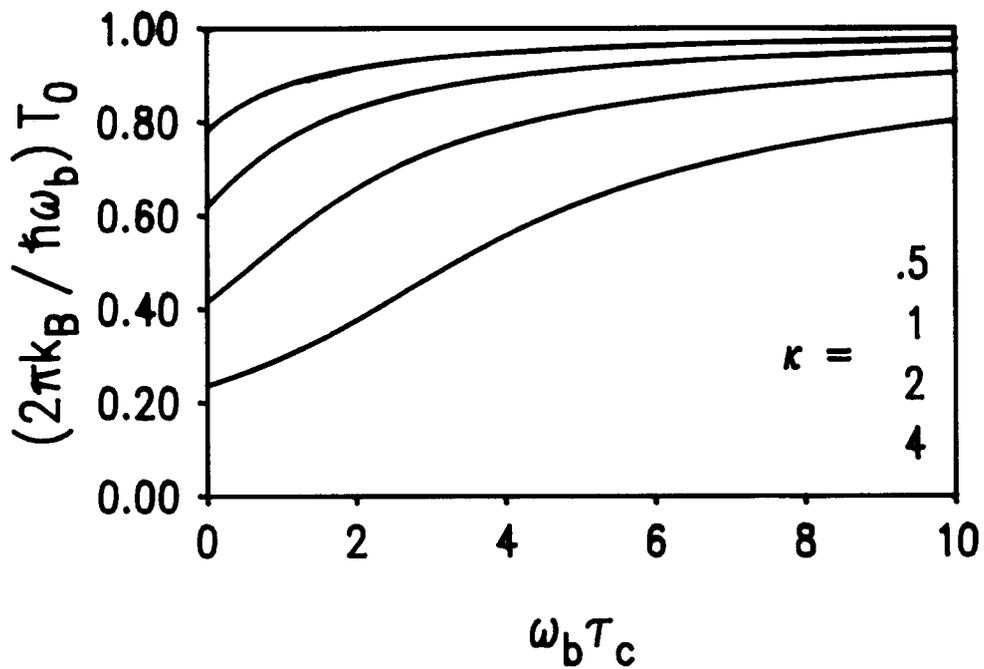


Abb. 5b: Abhängigkeit der crossover-Temperatur von der Gedächtniskorrelationszeit τ_c für das Drude-Modell mit verschiedenen Dämpfungstärken $\kappa = \gamma_0 / \omega_b$.

Diskutiert man das Verhalten der crossover-Temperatur T_0 in Abhängigkeit von der Dämpfungsstärke γ_0 und der Gedächtniskorrelationszeit τ_c , so stellt man für beide hier betrachteten Modelle folgendes fest. Unabhängig von τ_c nimmt die crossover-Temperatur mit zunehmender Dämpfung ab. Dies hatten wir bereits für den ohmschen Fall gefunden. Für $\tau_c \rightarrow 0$ erhält man, wie erwartet, das Resultat für ohmsche Dämpfung (3.18). Vergrößert man jedoch die Gedächtniskorrelationszeit, so nimmt die crossover-Temperatur zu, um schließlich den Wert für den ungedämpften Fall zu erreichen. Dies ist eine Konsequenz der Tatsache, daß die Dämpfung verschwindet, wenn die Abschneidefrequenz gegen Null geht. Insgesamt stellen wir fest, daß sich Gedächtniseffekte stark auf die crossover-Temperatur T_0 auswirken können, und es daher in entsprechenden Systemen wichtig ist, diese zu berücksichtigen.

4. Globale Phasenkohärenz in granularen Supraleitern

Die in diesem Kapitel dargestellten Überlegungen wurden motiviert durch Experimente an granularen supraleitenden Filmen, deren Resultate es nahelegen, daß der Übergang von lokaler zu globaler Phasenkohärenz in diesen Systemen durch den Einfluß von Dissipation bestimmt wird. Da bekannt ist, daß das Resistively Shunted Junction-Modell, im folgenden kurz RSJ-Modell genannt, für einen einzelnen Josephsonkontakt bei Temperatur Null auf einen Phasenübergang dieser Art führt, soll hier das Verhalten eines ganzen Netzes von solchen RSJ-Kontakten untersucht werden. Nach einer kurzen Darstellung der für dieses Kapitel relevanten Resultate des Experiments wird das Modell vorgestellt und seine Beziehung zum Experiment diskutiert. Dann wird mit Hilfe einer Variationsrechnung das Phasendiagramm für eine regelmäßige Anordnung von Josephsonkontakten hergeleitet. Unter Verwendung eines perkolationsartigen Arguments wird gezeigt, daß diese Resultate auch auf ein ungeordnetes System, wie zum Beispiel die granularen Supraleiter, anwendbar sind. Abschließend soll kurz angedeutet werden, wie man mit anderen Methoden weitere Aussagen über das Phasendiagramm machen kann.

4.1. Das Experiment

An der Universität von Minnesota wurden in einer kombinierten Ultrahochvakuum-Tiefemperatur-Apparatur bei einer Temperatur von etwa 15 K Zinn [22], Gallium [23,24], Blei und Indium [24], die alle bei genügend tiefen Temperaturen im Volumen supraleitend werden, mittels Molekularstrahlexpitaxie auf ein mikroskopisch sehr ebenes Aluminiumsubstrat aufgedampft. Damit lassen sich zweidimensionale, sogenannte granuläre Filme herstellen, bei denen kleine Inseln oder Körner gebildet werden und nicht ein kontinuierlicher Film. Da das Material durch Abschrecken kondensiert wurde, sind die Proben äußerst empfindlich. Erwärmen auf zu hohe Temperaturen würde zu irreversiblen Veränderungen führen. Aus diesem Grund hat man keine elektronenmikroskopischen Aufnahmen, die über die genaue Struktur dieser Filme Aufschluß geben könnten. Man kann jedoch davon ausgehen, daß die Inseln einen Durchmesser von deutlich über 30 Å haben, einer kritischen Größe, unterhalb der für typische Materialien keine Supraleitung möglich ist [47]. Ein wichtiger Parameter für das Experiment ist der spezifische Widerstand pro Flächeneinheit R_N bei

"hohen" Temperaturen von etwa 15 K. Dieser Widerstand hängt von der mittleren Filmdicke ab, die sich für jede Probe in situ in Schritten von nominal etwa $0,2 \text{ \AA}$, also viel weniger als einer Atomlage, vergrößern ließ. Mißt man nun den Widerstand der Probe als Funktion der Temperatur bis hinunter zu $0,65 \text{ K}$, so findet man sehr verschiedenes Verhalten der Proben, das sehr empfindlich von R_N abhängt [22,24]. Nachdem man genug Material aufgedampft hat, um zum ersten Mal eine endliche Leitfähigkeit in der Probe zu haben, findet man zunächst, daß der Widerstand mit abnehmender Temperatur stark ansteigt. Vergrößert man die Probendicke, so entwickelt die $R(T)$ -Kurve ein Minimum bei einer endlichen Temperatur, der Widerstand geht jedoch weiterhin gegen Unendlich für $T \rightarrow 0$. Verringert

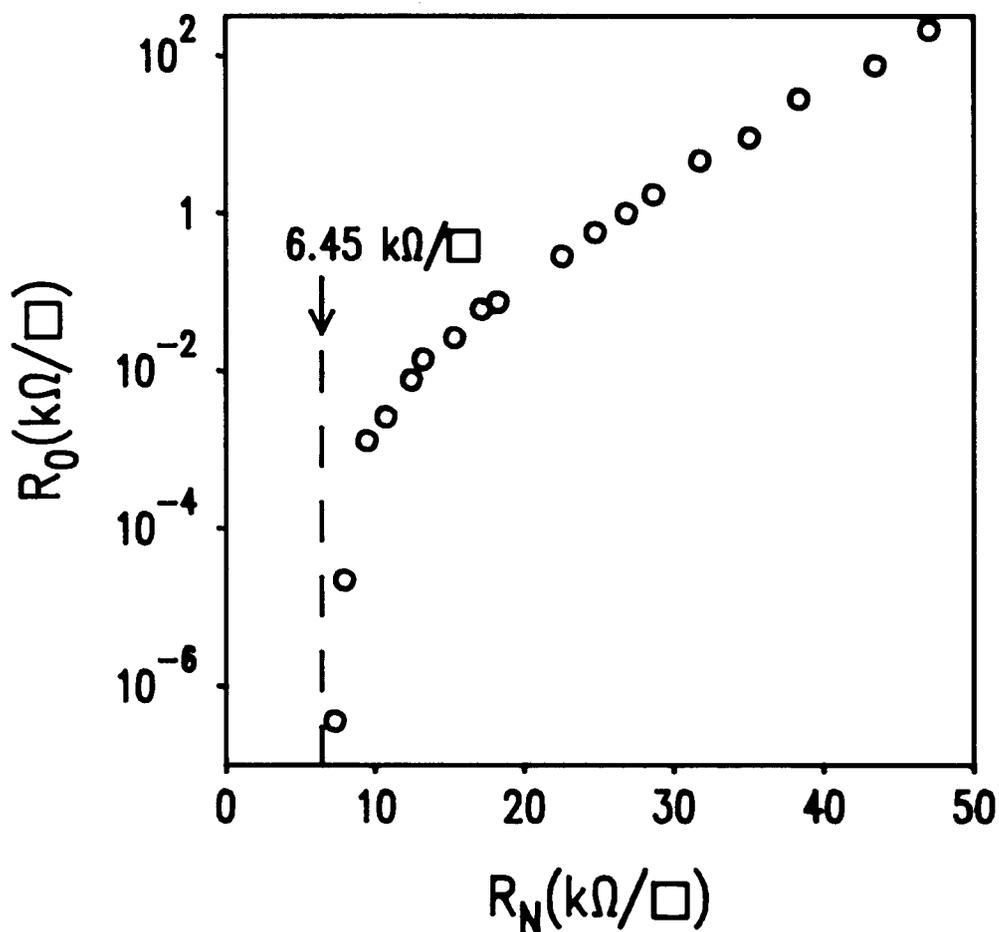


Abb. 6: Der auf die Flächeneinheit bezogene Widerstand R_0 bei tiefen Temperaturen von etwa $0,7 \text{ K}$ zeigt in Abhängigkeit vom Widerstand R_N bei höheren Temperaturen von etwa 14 K einen dramatischen Abfall bei $R_N \approx 7 \text{ k}\Omega/\square$ (nach Daten der Ga20-Probe im Anhang von Ref. 24, siehe auch [23])

man den Hoch-Temperatur-Widerstand R_N weiter, so fällt der Widerstand bei einer endlichen Temperatur stark ab, um dann für Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt ein Plateau bei R_0 zu erreichen. Weitere Absenkung von R_N führt schließlich dazu, daß man unterhalb einer endlichen Sprungtemperatur keinen Widerstand mehr mißt. Man interpretiert diesen Zustand als globale Supraleitung, während man bei der Abnahme des Widerstands auf einen endlichen Wert davon ausgeht, daß die einzelnen Inseln nur lokal supraleitend werden. Trägt man R_0 über R_N auf, so findet man für $R_N \approx 7 \text{ k}\Omega/\square$ einen dramatischen Abfall für R_0 , der auf diesen Phasenübergang zur globalen Supraleitung hindeutet. Die Tatsache, daß es einen solchen Phasenübergang gibt, ist nicht so überraschend. Seit mehreren Jahren wird in der Literatur diskutiert, wie Ladungsfluktuationen zur Unterdrückung von globaler Supraleitung führen können [48]. Das Minnesota-Experiment zeigt jedoch, daß der kritische Widerstand, bei dem R_0 auf Null abfällt, für alle Proben, die gemessen wurden, unabhängig vom Material etwa bei $R_0 = h/4e^2 = 6,45 \text{ k}\Omega$ liegt. Dies ist deshalb bemerkenswert, weil die einzelnen Proben sehr verschieden sein können, was z.B. die Größe und die relative Lage der Inseln anbetrifft. Experimentell ist dies unter anderem daran zu sehen, daß die einzelnen Proben für sehr verschiedene Dicken zum ersten Mal leitend werden. Es liegt nun also nahe, zu vermuten, daß Dissipation einen wesentlichen Einfluß auf das Auftreten von globaler Supraleitung in diesen granularen Supraleitern hat.

4.2. Das Modell

Gemäß der Diskussion im vorigen Abschnitt gehen wir davon aus, daß eine Ansammlung von Inseln aus supraleitendem Material vorliegt. Sind diese Inseln nicht zu klein, so wird jede für sich unterhalb einer Sprungtemperatur T_c supraleitend. Diese lokale Sprungtemperatur ist materialabhängig und hat in diesen Systemen nicht notwendigerweise den selben Wert wie in einem großen Volumen des Materials. Unterhalb der lokalen Sprungtemperatur wird jede der supraleitenden Inseln durch einen komplexen Ordnungsparameter $\Delta e^{i\phi}$ charakterisiert. Der reelle Betrag Δ gibt an, wieviele Teilchen bosekondensiert sind, das heißt wieviele Elektronen als Cooperpaare vorliegen. Er ist gleichzeitig ein Maß für die Energielücke zwischen dem Grundzustand, also dem Bose-Kondensat, und den angeregten Zuständen, den sogenannten Quasiteilchen. Da wir uns für

Temperaturen T interessieren, die viel kleiner als die Sprungtemperatur T_c sind, können wir Fluktuationen in Δ vernachlässigen. Gemäß dem Gleichstrom-Josephson-Effekt hängt der Gradient der Phase ϕ des Ordnungsparameters mit dem Fließen eines Cooperpaarstromes, dem sogenannten Josephsonstrom, zusammen. Auf diese Weise erfüllt ϕ eine doppelte Funktion. Als Phase des Ordnungsparameters ist sie eine thermodynamische Größe, die den makroskopischen Quantenzustand des Bosekondensats beschreibt. Andererseits ist sie eine dynamische Variable, die auf Grund ihres Zusammenhangs mit einem Strom eine Bewegungsgleichung erfüllt, in der auch dissipative Terme vorkommen können. Während es klassisch nicht möglich wäre, daß Dissipation die Thermodynamik beeinflusst, ist es in der quantenmechanischen Betrachtung diese Doppelfunktion, die erst einen dissipativen Phasenübergang ermöglicht.

Nachdem wir nun wissen, wie die einzelnen supraleitenden Inseln zu beschreiben sind, wenden wir uns der Frage zu, wie diese Inseln miteinander wechselwirken. Wir stellen uns dazu vor, daß jeweils zwei benachbarte Inseln einen Josephsonkontakt bilden, so daß ein ungeordnetes Netzwerk von solchen Kontakten vorliegt. Dabei wird vorausgesetzt, daß sich dieses Netzwerk ohne Unterbrechung von einem Ende der Probe zum anderen erstreckt, wobei aber nicht alle benachbarten Inseln tatsächlich einen Josephsonkontakt bilden, also Bestandteil des Netzes sein müssen. Bevor wir uns dem Netzwerk zuwenden, wollen wir zunächst einen einzelnen Josephsonkontakt herausgreifen und diesen näher betrachten. Zwischen den beiden supraleitenden Teilen eines Josephsonkontaktes, die durch eine Barriere getrennt sind, fließen drei Arten von Strömen, die jeweils durch das Verhalten der Differenz $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$ der Phasen links und rechts der Barriere bestimmt sind. Der Josephsonstrom I_j , der oben schon kurz angesprochen wurde, fließt ohne das Auftreten einer Spannung U zwischen den beiden Supraleitern und wird von den Cooperpaaren getragen. Er ist jedoch immer kleiner als ein kritischer Strom I_c . Der Zusammenhang mit der Phasendifferenz $\Delta\phi$ ist gegeben durch

$$I_j = I_c \sin(\Delta\phi). \quad (4.1)$$

Der zweite Anteil hängt mit dem Fluß von Quasiteilchen zusammen. Dabei kommt es zu einem Spannungsabfall U am Josephsonkontakt. Mit der nicht-

linearen Strom-Spannungs-Charakteristik ergibt sich der zugehörige Strom zu

$$I_q = \frac{U}{R(U)} = \frac{\hbar}{2eR(U)} \dot{(\Delta\phi)}, \quad (4.2)$$

wobei wir ausgenutzt haben, daß die Spannung proportional zur Zeitableitung der Phasendifferenz ist. Schließlich tritt noch ein Verschiebungsstrom

$$I_v = CU = \frac{\hbar}{2e} C \ddot{(\Delta\phi)} \quad (4.3)$$

auf, der durch die Kapazitäten im Josephsonkontakt verursacht wird. Unter Berücksichtigung dieser drei Ströme erhält man aus (4.1-4.3) eine Bewegungsgleichung für die Phasendifferenz $\Delta\phi$. Häufig verwendet man zur Beschreibung von Josephsonkontakten das sogenannte Resistively Shunted Junction-Modell (kurz RSJ-Modell) [49]. Dabei wird der nichtlineare Widerstand $R(U)$ durch einen ohmschen Widerstand R ersetzt. Man betrachtet somit also den verlustlosen Josephsonstrom und einen Normalstrom durch den Widerstand R . In realen Kontakten hat man häufig einen parallelen Nebenschluß-Widerstand (Shunt) womit die gemachte Näherung sehr gut wird. Es muß jedoch betont werden, daß keineswegs klar ist, daß es in den granularen Filmen des Minnesota-Experiments einen Normalkanal bis zu sehr tiefen Temperaturen gibt. Solange jedoch nicht geklärt ist, warum der Normalwiderstand R_N eine so entscheidende Rolle im Experiment spielt, ist es wichtig, die möglichen Modelle, also z.B. ein Modell mit Quasiteilchentunneln [50] oder das RSJ-Modell [51-54], zu untersuchen. Unabhängig von der Erklärung des Phasenübergangs zur globalen Supraleitung in granularen Filmen gibt es noch zwei weitere Gründe, ein Netzwerk von RSJ-Kontakten zu untersuchen, wie wir es weiter unten tun wollen. Zum einen ist es durchaus denkbar, daß man mit den fortschreitenden Möglichkeiten der Mikrofabrikation regelmäßige Netzwerke herstellen kann, wobei sich sogar die Größe des Shunt-Widerstands wählen läßt und damit eine Überprüfung der Vorhersagen der Theorie möglich wird. Zum zweiten weiß man, daß ein einzelner RSJ-Kontakt einen dissipativen Phasenübergang bei Temperatur Null zeigt [27] und es ist daher interessant, zu untersuchen, wie sich ein entsprechendes Netzwerk verhält.

Für das RSJ-Modell läßt sich jetzt unter Verwendung von (4.1-4.3) und mit $R(U) = R_N$ die Bewegungsgleichung für $\Delta\phi$ angeben. Sie lautet bei verschwindendem Gesamtstrom durch den Kontakt

$$\frac{\hbar^2}{E_0} (\Delta\phi)'' + \frac{\hbar}{2\pi} \frac{R_Q}{R_N} (\Delta\phi)' + V \sin(\Delta\phi) = 0. \quad (4.4)$$

Im ersten Term haben wir dabei die Ladungsenergie E_0 , gegeben durch

$$E_0 = \frac{4e^2}{C}, \quad (4.5)$$

eingeführt. Der zweite, dissipative Term ist bestimmt durch den Normalwiderstand und den bereits weiter oben erwähnten Widerstand

$$R_Q = \frac{h}{4e^2} = 6,45\text{k}\Omega. \quad (4.6)$$

Im dritten Term schließlich tritt die Josephsonkopplungsenergie V auf, die mit dem kritischen Strom I_c gemäß

$$V = \frac{\hbar I_c}{2e} \quad (4.7)$$

zusammenhängt. Die vorstehende Diskussion des RSJ-Modells können wir in einem Ersatzschaltbild zusammenfassen. Bestandteile sind ein Josephson-element, das einen verlustfreien Josephsonstrom kleiner als I_c erlaubt,

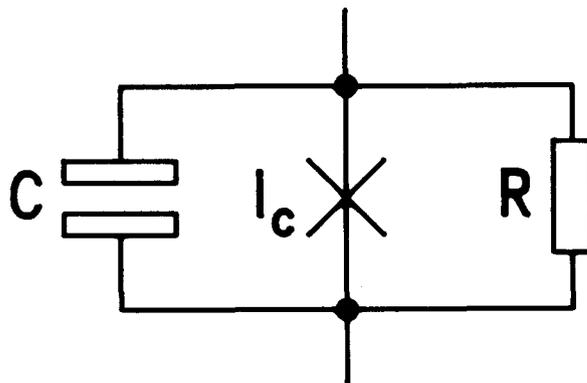


Abb. 7: Ersatzschaltbild für das RSJ-Modell

eine dazu parallele Kapazität sowie ein ebenfalls paralleler Shunt-Widerstand.

Der Dämpfungsterm in der klassischen Bewegungsgleichung (4.4) schreibt uns nun vor, wie wir in der quantenmechanischen Betrachtung das Bad anzusetzen haben. Im Rahmen unseres Modells des Wärmebads als Ansammlung von linear an des System gekoppelten harmonischen Oszillatoren ist somit die spektrale Dichte der Badoszillatoren gegeben. Hier wird deutlich, daß dieses Modell nicht wirklich mikroskopisch ist in dem Sinne, daß es nichts über den tatsächlichen Dissipationsmechanismus aussagt. Wir wissen nur, daß dieser als ohmscher Dämpfungsterm in der Bewegungsgleichung auftritt und sind damit schon in der Lage, die Dissipation richtig zu modellieren. Durch entsprechende Interpretation der mechanischen Größen in der klassischen Bewegungsgleichung (2.19) finden wir mit (2.29) für die spektrale Dichte der Badoszillatoren

$$I(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \alpha |\omega|, \quad (4.8)$$

wobei die dimensionlose Dämpfungsstärke α gegeben ist durch

$$\alpha = \frac{R_Q}{R_N}. \quad (4.9)$$

Die Dämpfungsstärke ist also umso größer, je kleiner der Normalwiderstand ist, da dann der Anteil des Normalstroms am Gesamtstrom zunimmt. Für die effektive euklidische Wirkung, in der die Badfreiheitsgrade bereits ausintegriert wurden, erhält man aus (2.66), (2.57) und (2.58) in der Notation für Josephsonkontakte

$$S_{\text{eff}} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{\hbar^2}{2E_0} (\Delta\phi)^2 + V\{1 - \cos(\Delta\phi)\} \right] + \frac{\beta\hbar^2}{4\pi} \alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\nu_n| |\Delta\tilde{\phi}(n)|^2. \quad (4.10)$$

Dabei ist $\Delta\tilde{\phi}(n)$ die Fouriertransformierte von $\Delta\phi(t)$ gemäß

$$\Delta\phi(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Delta\tilde{\phi}(n) \exp(i\nu_n t). \quad (4.11)$$

Für die effektive Wirkung (4.10) findet man unter Anwendung der Renormierungsgruppentheorie einen Phasenübergang zu Lokalisierung und damit zu Phasenkohärenz für $\alpha > 1$ [27]. Dies ist jedoch nur für $T=0$ möglich, da nur dann ein eindimensionales System mit langreichweitiger Wechselwirkung, vermittelt durch den dissipativen Term, vorliegt. Dieses Verhalten, das von der Unterdrückung von Fluktuationen durch Dissipation herührt, findet man auch, wenn man das periodische Potential in (4.10) durch ein Doppelmuldenpotential ersetzt [55]. Dieses Problem kann auf das Kondoproblem abgebildet werden, wobei $\alpha=1$ gerade der Trennungslinie zwischen dem antiferromagnetischen ($\alpha < 1$) und dem ferromagnetischen ($\alpha > 1$) Kondoproblem entspricht [56]. Wesentlich für diese Phasenübergänge ist, daß die spektrale Dichte $I(\omega)$ für kleine Frequenzen proportional mit ω ansteigt. Man könnte also in (4.8), um das Modell realistischer zu machen, eine Abschneidefunktion für hohe Frequenzen einführen, ohne das Resultat zu beeinflussen. In der Tat führt bereits der kapazitive Term zu einem Hochfrequenzabschneiden. Die Sonderstellung der ohmschen Dämpfung mit $I(\omega) \sim \omega$ wird auch bei der Realzeitbehandlung des freien Teilchens nochmals deutlich werden.

Nach dieser Diskussion eines RSJ-Josephsonkontakts betrachten wir ein Netz solcher Kontakte. Auf Grund des oben gesagten kann man erwarten, daß auch das Netzwerk einen dissipativen Phasenübergang zeigt. Während wir für einen endlichen Kontakt jedoch $T=0$ fordern mußten, kann man hoffen, daß diese Bedingung für ein Netzwerk mit Dimension $d \geq 1$ entfällt. Tatsächlich findet man ja auch im Experiment den Übergang zu globaler Supraleitung bei endlichen Temperaturen. Des weiteren werden wir im Abschnitt 4.7. sehen, daß das zweidimensionale, klassische Modell ohne Dissipation einem 2d-XY-Modell entspricht, welches bei endlichen Temperaturen den sogenannten Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang zeigt.

Um die effektive Wirkung für das RSJ-Josephsonkontaktnetzwerk aufzustellen, werden die einzelnen Inseln mit einem Index durchnummeriert. Neben den Phasen ϕ_i definieren wir die Phasendifferenz

$$\Delta\phi_{ij} = \phi_i - \phi_j \quad (4.12)$$

sowie analog zu (4.11) deren Fouriertransformierte $\Delta\tilde{\phi}_{ij}(n)$. Als Verallgemeinerung von (4.10) erhalten wir somit

$$\begin{aligned}
S_{\text{eff}} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau & \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\hbar}{2e}\right)^2 \dot{\phi}_i C_{ij} \dot{\phi}_j + \sum_{\langle ij \rangle} V_{ij} \{1 - \cos(\Delta\phi_{ij})\} \right) \\
& + \frac{\beta\hbar^2}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\nu_n| \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} |\Delta\tilde{\phi}_{ij}(n)|^2.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Im ersten Term sind mit der Kapazitätsmatrix C_{ij} die kapazitiven Effekte zwischen allen Inseln berücksichtigt worden. Die dabei auftretende Ableitung von ϕ_i ist die konjugierte Variable zur Zahl der Cooperpaare n_i auf der Insel i [57]. $\langle ij \rangle$ soll andeuten, daß über alle nächsten Nachbarn zu summieren ist. Neben dieser kurzreichweitigen Wechselwirkung in Raumrichtung existiert in der Zeitrichtung eine langreichweitige Wechselwirkung, die durch den dissipativen Term vermittelt wird und die proportional $1/t^2$ abfällt. Um die Rechnung zu vereinfachen, wollen wir zunächst ein regelmäßiges Gitter betrachten und uns erst am Schluß Gedanken über die möglichen Effekte von Unordnung machen. Wir setzen also im weiteren

$$V_{ij} = V, \quad \alpha_{ij} = \alpha.$$

In der Kapazitätsmatrix kann man zwei wesentliche Effekte unterscheiden. Eine Möglichkeit ist, nur die Diagonalelemente C_{ii} mitzunehmen. Bei diesem sogenannten Selbstladungsmodell stellt man sich vor, daß die Kapazität einer Insel mit dem Substrat dominiert. Dies ist eine gute Näherung für ebene Systeme, bei denen eine genügend dicke isolierende Schicht vorhanden ist, unter der sich ein auf Masse liegendes Metall befindet. Die andere Möglichkeit ist, nur nächste Nachbar-Terme zu berücksichtigen. Dabei tritt in der Wirkung die Zeitableitung der Phasendifferenz zweier benachbarter Inseln auf. Zunächst könnte man meinen, daß es für die Rechnung einfacher sei, den zweiten Fall zu betrachten, da dann nur Phasendifferenzen in der Wirkung vorkommen. Dies ist jedoch nicht der Fall, da die Phasen und nicht deren Differenzen die physikalisch relevanten Variablen sind. Da es aber d -mal so viele Phasendifferenzen wie Phasen gibt, muß man entsprechend viele Zwangsbedingungen mitnehmen. Nur

in eindimensionalen Systemen kann man zur Phasendifferenz als physikalischer Variable übergehen. Wir wollen im Rahmen dieser Arbeit vom Selbstladungsmodell Gebrauch machen und

$$C_{ij} = C\delta_{ij}$$

setzen. Damit lautet die effektive Wirkung unseres Modell schließlich

$$S_{\text{eff}} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{\hbar^2}{2E_0} \sum_i \dot{\phi}_i^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} \{1 - \cos(\Delta\phi_{ij})\} \right] \\ + \frac{\beta\hbar^2}{4\pi} \alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\nu_n| \sum_{\langle ij \rangle} |\Delta\tilde{\phi}_{ij}(n)|^2. \quad (4.14)$$

Dieses Modell wurde ohne Dissipation, also für $\alpha=0$, schon seit längerer Zeit in der Literatur diskutiert [48], wobei es um die Frage ging, ob Ladungsfluktuationen, die durch den ersten Term beschrieben werden, Supraleitung zerstören können. Schon dieses Problem läßt sich nicht exakt behandeln, so daß wir für das dissipative Problem erst recht zu Näherungsverfahren greifen müssen. Bevor wir dies im nächsten Abschnitt mit einer Variationsrechnung tun, soll hier noch einmal kurz das Ziel formuliert werden. Es interessiert uns die Antwort auf die Frage, in welchem Parameterbereich ($\alpha, V/E_0, k_B T$) globale Supraleitung im Modell (4.14) möglich ist. Es geht uns also nicht darum, die Vielfalt der experimentell beobachteten Temperaturabhängigkeiten des Probenwiderstands zu analysieren. Ebenso wenig werden wir den Fall mit äußerem Magnetfeld betrachten, der in der Literatur für die Josephsonkopplung, also den zweiten Term in (4.14), betrachtet wird und zu dem Phänomen der Frustration führt. Für eine neuere Darstellung dieses Gebietes verweisen wir auf Referenz 58.

4.3. Variationsrechnung

Ausgehend von der effektiven Wirkung (4.14) wollen wir jetzt eine Anordnung von Josephsonkontakten auf einem regelmäßigen d-dimensionalen Hyperwürfel betrachten. Während die Dimension d für den Rechenweg unerheblich ist, werden wir die Resultate nur für eine lineare Kette ($d=1$),

ein quadratisches Gitter ($d=2$) und den Würfel ($d=3$) diskutieren. Aus der Rechnung wird deutlich werden, daß sich die Verallgemeinerung auf andere Gitter, die nur aus gleichwertigen Bindungen bestehen, leicht durchführen läßt, da das Gitter nur über einen Strukturfaktor eingeht. Von experimenteller Relevanz ist vor allem der Fall $d=2$, obwohl in jüngster Zeit auch der Übergang zum dreidimensionalen Fall untersucht wurde [59]. Dabei tritt jedoch im Gegensatz zu $d=2$ im Probenwiderstand die Dicke der Probe und damit deren Geometrie auf.

Um beurteilen zu können, ob das System global supraleitend wird, müssen wir untersuchen, wie sich die Phasen ϕ_i auf den einzelnen Inseln verhalten. Während jede Insel für sich eine bestimmte Phase hat und somit Phasenkohärenz innerhalb der Insel besteht, ist jetzt die Frage, wie stark diese Phasen untereinander gekoppelt sind. Das Auftreten von globaler Phasenkohärenz im Netzwerk ist gleichbedeutend mit globaler Supraleitung. Um dies beantworten zu können, wollen wir mit Hilfe einer Versuchswirkung S_0 , die einen freien Parameter enthält, näherungsweise die freie Energie berechnen. Durch Minimierung der freien Energie sind wir dann in der Lage, diesen freien Parameter zu bestimmen und Aussagen über die globale Phasenkohärenz zu machen. Zur Abschätzung der tatsächlichen freien Energie F verwenden wir die Gibbs-Helmholtz-Ungleichung [60]

$$F' = F_0 + \langle V(\Delta\phi_{ij}) - V_0(\Delta\phi_{ij}) \rangle_0 \geq F. \quad (4.15)$$

wobei wir hier speziell angesetzt haben, daß nur die potentielle Energie, also die Josephsonkopplung, im Variationsansatz abgeändert wird. Dabei bezeichnet $V(\Delta\phi_{ij})$ den Josephsonkopplungsterm in (4.14) und $V_0(\Delta\phi_{ij})$ den entsprechenden Term in der Wirkung S_0 . F_0 ist die zur Versuchswirkung S_0 gehörende freie Energie und $\langle \dots \rangle_0$ gibt an, daß der Mittelwert bezüglich der zum Ansatz gehörenden Verteilung zu nehmen ist. Der Ansatz für die Versuchswirkung S_0 ist nun erstens so zu wählen, daß er erlaubt, die Rechnung durchzuführen. Genauso wichtig ist es aber, diesem Ansatz eine physikalische Grundlage zu geben, um zu verlässlichen Resultaten zu kommen. Beide Kriterien werden von der Wirkung

$$S_0 = \int_0^{\hbar\beta} dr \left[\frac{\hbar^2}{2E_0} \sum_i \dot{\phi}_i^2 + \frac{D}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \Delta\phi_{ij}^2 \right] + \frac{\beta\hbar^2}{4\pi} \alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\nu_n| \sum_{\langle ij \rangle} |\Delta\tilde{\phi}_{ij}(n)|^2 \quad (4.16)$$

erfüllt. Da dieses S_0 auf Gaußsche Integrale führt, läßt sich die freie Energie F' exakt auswerten. Gegenüber der exakten Wirkung (4.14) wurde nur der Josephsonkopplungsterm durch den harmonischen Term in (4.16) ersetzt. Der Variationsparameter D , der durch Minimierung von F' zu bestimmen ist, gibt an, wie stark die Phasen auf benachbarten Inseln gekoppelt sind. Die physikalische Vorstellung dabei ist, daß ein verschwindendes D eine Situation beschreibt, in der die Phasen ungekoppelt sind, während globale Phasenkohärenz einem von Null verschiedenen D entspricht. Da das tatsächliche Potential durch ein harmonisches Potential ersetzt wird, dessen Stärke mit Hilfe von (4.15) selbstkonsistent bestimmt wird, nennen wir dieses Verfahren auch selbstkonsistente harmonische Näherung.

Bevor wir mit der Durchführung der Variationsrechnung beginnen, wollen wir noch kurz einen Punkt diskutieren, der das Verhalten unter der Transformation $\phi_i \rightarrow \phi_i + 2\pi$ betrifft. Das in (4.14) auftretende Potential ist invariant unter dieser Transformation während das Potential in S_0 keine 2π -Periodizität aufweist. Eine Möglichkeit wäre, das harmonische Potential durch ein periodisches Potential zu ersetzen, das stückweise aus harmonischen Anteilen besteht. Der Unterschied macht sich jedoch nur dann bemerkbar, wenn die Phasenfluktuationen von der Ordnung π werden, was insbesondere für kleine D der Fall sein kann. Für einen großen Teil unserer Resultate ist dieser Punkt nicht von Bedeutung. Wir werden jedoch auch einen Bereich finden, in dem D am Phasenübergang kontinuierlich von Null ausgehend anwächst und somit auch kleine D auftreten. Im Abschnitt 4.7. geben wir ein Argument dafür, daß man in der Fortsetzung dieses Bereichs zu starker Josephsonkopplung hin noch einen Phasenübergang finden sollte. Dieser läßt sich im Rahmen der Variationsrechnung, wie sie hier beschrieben wird, nicht finden. Andererseits interessieren wir uns besonders für den Fall schwacher Josephsonkopplung oder großer Ladungsenergien, da dort Dissipation eine besonders große Rolle spielt.

Bei der Berechnung von F' stellt sich auch die Frage, ob man bei der Integration über die Phasen ϕ_i und $\phi_i + 2\pi$ identifizieren und dann zusätzlich Windungszahlen betrachten muß. Dieser Punkt hat nach der obigen Diskussion kaum einen Einfluß auf die Resultate der Variationsrechnung. Außerdem wird man bei einem ohmschen Modell, das einen kontinuierlichen Ladungstransfer durch den Normalkanal zuläßt, diese Identifikation nicht

vornehmen und somit die Integration über ϕ_i von $-\infty$ bis $+\infty$ laufen lassen. Hier besteht ein Unterschied zum Modell mit Quasiteilchentunneln, wo der Ladungstransfer nur diskret möglich ist.

Um die freie Energie F_0 zu bestimmen, stellen wir die Zustandssumme Z_0 durch ein Wegintegral über $\exp(-S_0/\hbar)$ dar. Dazu ist es praktisch, alle in S_0 auftretenden ϕ_i sowohl gemäß (4.11) zeitlich als auch mit

$$\phi_i = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \vec{R}_i) \quad (4.17)$$

räumlich nach Fourier zu transformieren. In (4.17) wird über alle Wellenvektoren \vec{k} der ersten Brillouinzone summiert und \vec{R}_i ist der Ort der i -ten von insgesamt N Inseln. Damit erhält man für die Phasendifferenzen

$$\sum_{\langle ij \rangle} \Delta\phi_{ij}^2 = \sum_{\vec{k}} |\phi_{\vec{k}}|^2 \left(z - 2 \sum_{j=1}^d \cos(k_j a) \right) = \sum_{\vec{k}} S_{\vec{k}} |\phi_{\vec{k}}|^2. \quad (4.18)$$

Im Strukturfaktor $S_{\vec{k}}$ ist z die Zahl der nächsten Nachbarn, die für das hyperkubische Gitter $2d$ ist, a die Gitterkonstante und k_j die Komponente von \vec{k} in Richtung des j -ten Eigenvektors. Einsetzen in die Wirkung (4.16) liefert

$$S_0 = \frac{\hbar\beta}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\hbar^2}{E_0} \nu_n^2 + \left(D + \frac{\hbar\alpha |\nu_n|}{2\pi} \right) S_{\vec{k}} \right) |\tilde{\phi}_{\vec{k}}(n)|^2. \quad (4.19)$$

Z_0 läßt sich nun durch Integration über alle $\tilde{\phi}_{\vec{k}}(n)$ berechnen. Man erhält bis auf einen Faktor, der nur einen konstanten Beitrag zu F_0 liefern wird

$$Z_0 \sim \prod_{n=0}^{\infty} \prod_{\vec{k}} \frac{\pi}{\beta} \left(\frac{\hbar^2}{E_0} \nu_n^2 + \left(D + \frac{\hbar\alpha \nu_n}{2\pi} \right) S_{\vec{k}} \right)^{-1}. \quad (4.20)$$

Daraus ergibt sich der von S_0 herrührende Anteil der freien Energie zu

$$\begin{aligned}
F_0 &= -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\vec{k}} \ln \left[\frac{\hbar^2}{E_0} \nu_n^2 + \left(D + \frac{\hbar \alpha \nu_n}{2\pi} \right) S_{\vec{k}} \right] \\
&\quad + \text{von } D \text{ unabhängige Terme.}
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Dabei müssen die von D unabhängigen Terme nicht näher bestimmt werden, da sie bei der Minimierung von F' bezüglich D keine Rolle spielen.

Der zweite Anteil von F' lautet

$$\langle V(\Delta\phi_{ij}) - V_0(\Delta\phi_{ij}) \rangle_0 = \left\langle V \sum_{\langle ij \rangle} \{1 - \cos(\Delta\phi_{ij})\} - \frac{D}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\Delta\phi_{ij}^2) \right\rangle_0. \tag{4.22}$$

Zur Auswertung des Mittelwerts des \cos -Terms benutzen wir die Identität

$$\langle \cos(\Delta\phi_{ij}) \rangle_0 = \exp \left[-\frac{1}{2} \langle \Delta\phi_{ij}^2 \rangle_0 \right], \tag{4.23}$$

die dann gilt, wenn über eine Gaußverteilung gemittelt wird, wie es wegen der speziellen Form von S_0 hier der Fall ist. Aus (4.22) wird somit

$$\langle V(\Delta\phi_{ij}) - V_0(\Delta\phi_{ij}) \rangle_0 = -V \sum_{\langle ij \rangle} \exp \left[-\frac{1}{2} \langle \Delta\phi_{ij}^2 \rangle_0 \right] - \frac{D}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \langle \Delta\phi_{ij}^2 \rangle_0, \tag{4.24}$$

sodaß wir nur noch die Varianz von $\Delta\phi_{ij}$ bezüglich S_0 ausrechnen müssen. Mit Hilfe von (4.18) erhält man zunächst

$$\left\langle \sum_{\langle ij \rangle} (\Delta\phi_{ij}^2) \right\rangle_0 = \frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\vec{k}} \frac{S_{\vec{k}}}{\hbar^2 \nu_n^2 / E_0 + \left(D + \hbar \alpha \nu_n / 2\pi \right) S_{\vec{k}}}, \tag{4.25}$$

wo wieder ein Gaußintegral über die $\tilde{\phi}_{\vec{k}}(n)$ zu berechnen war. Da alle Bindungen ij gleichberechtigt sind, müssen wir noch durch die Zahl der

Bindungen dividieren und erhalten somit

$$\langle \Delta\phi_{ij}^2 \rangle_0 = \langle \Delta\phi^2 \rangle_0 = \frac{2}{\beta N d} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\vec{k}} \frac{S_{\vec{k}}}{\hbar^2 \nu_n^2 / E_0 + (D + \hbar \alpha \nu_n / 2\pi) S_{\vec{k}}}. \quad (4.26)$$

Wir lassen im weiteren die Indizes i und j weg, um anzudeuten, daß die Fluktuationen der Phasendifferenz davon unabhängig sind. Ableiten von F' bezüglich D ergibt mit (4.21), (4.24) und (4.25) die selbstkonsistente Gleichung

$$\frac{D}{V} = \exp\left[-\frac{1}{2} \langle \Delta\phi^2 \rangle_0\right]. \quad (4.27)$$

Unter Verwendung von (4.26) und (4.27) läßt sich jetzt also der freie Parameter D bestimmen und eine Aussage über globale Phasenkohärenz machen.

Um die Auswertung von $\langle \Delta\phi^2 \rangle_0$ zu vereinfachen, wollen wir den tatsächlichen Strukturfaktor durch seine Näherung für kleine k ersetzen, da das kritische Verhalten des Systems nur durch das Verhalten bei kleinen Wellenzahlen bestimmt wird. Der quantitative Verlauf der Phasenkurve hängt zwar von den Details der Brillouinzone und des Modenspektrums ab, das qualitative Aussehen des Phasendiagramms, insbesondere die Existenz von Phasenübergängen ist unabhängig davon. Um dieses Verfahren konsistent zu machen, führt man eine kreis- oder kugelförmige Brillouinzone ein, deren Volumen gleich dem Volumen der ursprünglichen Brillouinzone ist. Für den Strukturfaktor ergibt sich dann das isotrope Resultat

$$S_{\vec{k}} = k^2 a^2 + O(k^4). \quad (4.28)$$

Der Radius der Brillouinzone ergibt sich durch Vergleich des Volumens eines d -dimensionalen Hyperwürfels der Kantenlänge $2\pi/a$ und des Volumens einer d -dimensionalen Hyperkugel mit Radius k_0

$$\left(\frac{2\pi}{a}\right)^d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} k_0^d, \quad (4.29)$$

wobei $\Gamma(z)$ die Gammafunktion bedeutet. Daraus erhält man insbesondere für $d = 1, 2, 3$

$$k_0 a = \pi \quad d = 1 \quad (4.30)$$

$$(k_0 a)^2 = 4\pi \quad d = 2 \quad (4.31)$$

$$(k_0 a)^3 = 6\pi^2 \quad d = 3 \quad (4.32)$$

Wird die Zahl der betrachteten Gitterpunkte sehr groß, so kann man im Limes $N \rightarrow \infty$ die Summation über alle k in eine Integration überführen. Mit der Substitution $y=ka$ ergibt sich

$$\langle \Delta \phi^2 \rangle_0 = \frac{2}{\beta(k_0 a)^d} \int_0^{k_0 a} dy \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^{d+1}}{\hbar^2 \nu_n^2 / E_0 + (D + \hbar \alpha \nu_n / 2\pi) y^2} . \quad (4.33)$$

Für die folgende Diskussion des Phasendiagramms sind (4.26), (4.27) und diese Näherungsformel die zentralen Gleichungen, die zu betrachten sind.

4.4. Das Phasendiagramm bei $T=0$

Der Fall $T=0$ zeichnet sich rechenstechnisch dadurch aus, daß die Matsubarafrequenzen ν_n , die proportional zur Temperatur sind, für abnehmende Temperaturen immer dichter liegen und für $T=0$ ein Kontinuum bilden. In diesem Limes wird die Summation über die ν_n in (4.33) zu einem Integral

$$\langle (\Delta \phi^2) \rangle_{0, T=0} = \frac{\hbar}{\pi(k_0 a)^d} \int_0^{k_0 a} dy \int_0^{\infty} d\omega \frac{y^{d+1}}{\hbar^2 \omega^2 / E_0 + (D + \hbar \alpha \omega / 2\pi) y^2} . \quad (4.34)$$

Wenden wir uns zunächst dem Fall schwacher Dämpfung, also kleiner α , zu. Hier schließt sich das bekannte Ergebnis für $\alpha=0$ an [48]. Man findet dort einen Phasenübergang von lokaler zu globaler Phasenkohärenz. Unterhalb einem bestimmten Wert für das Verhältnis V/E_0 , wenn also die Ladungsenergie dominierend wird, gelingt es den Ladungsfluktuationen, die globale Supraleitung zu zerstören. Aus (4.34) erhalten wir durch Entwicklung nach α und Ausführung der beiden Integrationen

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_{0,T=0} = \frac{1}{2(d+1)} \left(\frac{E_0}{D} \right)^{1/2} k_0 a - \alpha \frac{1}{4\pi^2(d+2)} \frac{E_0}{D} (k_0 a)^2 + O(\alpha^2). \quad (4.35)$$

Für $d \leq 3$ geben wir die expliziten Ergebnisse an:

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_{0,T=0} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{E_0}{D} \right)^{1/2} - \alpha \frac{1}{12} \frac{E_0}{D} + O(\alpha^2) \quad d=1 \quad (4.36)$$

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_{0,T=0} = \frac{\pi^{1/2}}{3} \left(\frac{E_0}{D} \right)^{1/2} - \alpha \frac{1}{4\pi} \frac{E_0}{D} + O(\alpha^2) \quad d=2 \quad (4.37)$$

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_{0,T=0} = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{8} \left(\frac{E_0}{D} \right)^{1/2} - \alpha \frac{(6\pi^2)^{2/3}}{20\pi^2} \frac{E_0}{D} + O(\alpha^2) \quad d=3. \quad (4.38)$$

Wir halten dabei als wichtiges Ergebnis fest, daß, wie wir es physikalisch erwarten, Fluktuationen durch zunehmende Ladungsenergie oder abnehmende Josephsonkopplung verstärkt und durch den Einfluß von Dissipation unterdrückt werden.

Im nächsten Schritt müssen wir die selbstkonsistente Gleichung (4.27) unter Verwendung von (4.35) lösen. Für $D \rightarrow 0$ werden die Fluktuationen der Phasendifferenzen immer stärker und $\langle \Delta\phi^2 \rangle_{0,T=0}$ divergiert. Daraus folgt, daß $D=0$ immer eine Lösung der selbstkonsistenten Gleichung ist und zwar diejenige, bei der keine globale Phasenkohärenz vorliegt. Die Frage ist jetzt, ob noch eine Lösung für nichtverschwindende D existiert, ob also globale Phasenkohärenz für gewisse Parameterbereiche V/E_0 bei kleinen α möglich wird. Durch Einsetzen von (4.35) in die rechte Seite von (4.27) findet man, daß die Steigung der Exponentialfunktion für $D \rightarrow 0$ verschwindet. Andererseits bleibt der Ausdruck für $D \rightarrow \infty$ immer endlich. Betrachtet man die beiden Seiten der Selbstkonsistenzgleichung (4.27) als Funktion des Variationsparameters D , so folgt, daß die Steigung $1/V$ der Geraden auf der linken Seite einen gewissen Wert nicht übersteigen darf, um eine nichttriviale Lösung $D \neq 0$ zu erlauben. Das bedeutet, daß die Josephsonkopplung V einen Mindestwert haben muß, damit sich trotz Fluktuationen globale Phasenkohärenz einstellen kann. Obwohl die Selbstkonsistenzgleichung eine transzendente Gleichung ist, kann man die kritische Josephsonkopplung V^* für kleine α analytisch berechnen. Von kleinen V her kommend ist die kritische Kopplung der Fall, bei der die Gerade der linken Seite von (4.27) Tangente der Funktion auf der rechten Seite

wird. Zusätzlich zu (4.27) erhalten wir also noch die Bedingung, daß die Ableitungen der beiden Seiten von (4.27) übereinstimmen müssen. Setzt man in diese zweite Bedingung die erste ein, so erhält man als Bestimmungsgleichung für den kritischen Variationsparameter D^*

$$-\frac{D}{2} \frac{d}{dD} \langle \Delta \phi^2 \rangle_{0, T=0} \Big|_{D=D^*} = 1. \quad (4.39)$$

Dieses Vorgehen ist natürlich unabhängig von den Bedingungen $T=0$ und kleine α und wird deshalb später wieder verwendet werden. Es sei noch darauf hingewiesen, daß bei diesem Verfahren nicht überprüft wird, daß $F'(D^*)$ auch wirklich kleiner als $F'(0)$ ist. Was wir hier berechnen ist die Spinodale, d.h. die Kurve, auf der die zweite Ableitung der freien Energie verschwindet. Dort entwickelt sich mit zunehmender Josephsonkopplung ein lokales Minimum. Um ein absolutes Minimum zu erhalten, muß die Josephsonkopplung einen Grenzwert überschreiten, der größer als V^* ist. Einsetzen von (4.35) liefert bis einschließlich erster Ordnung in α eine quadratische Gleichung in $(E_0/D)^{1/2}$. Die gesuchte Lösung für D^* ergibt sich daraus zu

$$\frac{D^*}{E_0} = \left[\frac{k_0 a}{8(d+1)} \right]^2 \left(1 - \alpha \frac{16(d+1)^2}{\pi^2(d+2)} \right) + O(\alpha^2). \quad (4.40)$$

Beim Phasenübergang von lokaler zu globaler Phasenkohärenz, der bei einer Josephsonkopplung $V^*(\alpha)$ stattfindet, springt also der Variationsparameter D^* von Null auf einen endlichen Wert. Wir nennen daher den Phasenübergang in diesem Bereich auch einen Übergang erster Ordnung. Es wird sich zeigen, daß dies in anderen Bereichen des Phasendiagramms nicht mehr der Fall ist. Wir wollen noch anmerken, daß es neben der Lösung (4.40) eine weitere Lösung der quadratischen Gleichung für D^* gibt, wobei $D^* \sim 1/\alpha$ divergiert. Diese Lösung ist ein Artefakt der Entwicklung in α und muß daher ausgeschlossen werden. Bis jetzt erfüllt D^* noch nicht die beiden Bedingungen, nämlich (4.27) und die sich daraus durch Ableiten ergebende Gleichung, sondern nur eine spezielle Kombination dieser. Durch Einsetzen von (4.40) in (4.27) erhält man aber das gesuchte V^* , das gerade dafür sorgt, daß beide Bedingungen erfüllt sind. Man erhält für die kritische Josephsonkopplung

$$\frac{V^*}{E_0} = \left(\frac{(k_0 a) e}{8(d+1)} \right)^2 \left(1 - \alpha \frac{8(d+1)^2}{\pi^2(d+2)} \right) + O(\alpha^2) \quad (4.41)$$

wobei wir $e = \exp(1)$ mit einem kursiven e bezeichnen, um es von der Elementarladung e zu unterscheiden. Speziell gilt

$$\frac{V^*}{E_0} = \left(\frac{\pi e}{16} \right)^2 \left(1 - \alpha \frac{32}{3\pi^2} \right) + O(\alpha^2) \quad d=1 \quad (4.42)$$

$$\frac{V^*}{E_0} = \left(\frac{\pi^{1/2} e}{12} \right)^2 \left(1 - \alpha \frac{18}{\pi^2} \right) + O(\alpha^2) \quad d=2 \quad (4.43)$$

$$\frac{V^*}{E_0} = \left(\frac{(6\pi^2)^{1/3} e}{32} \right)^2 \left(1 - \alpha \frac{128}{5\pi^2} \right) + O(\alpha^2) \quad d=3. \quad (4.44)$$

Wir haben somit einen Phasenübergang erster Ordnung gefunden, bei dem die kritische Josephsonkopplung V^* mit zunehmender Stärke der Dissipation α abnimmt, da die Phasenfluktuationen durch Dissipation unterdrückt werden.

Über die erste Ordnung in α hinausgehende Rechnungen sind zunächst nicht analytisch möglich, das Phasendiagramm läßt sich aber leicht numerisch bestimmen. Es gibt jedoch einen Bereich, in dem wieder analytische Ergebnisse zu erhalten sind. Zunächst findet man durch Betrachtung von (4.40), daß der Sprung des Variationsparameters von Null auf D^* mit zunehmendem α abnimmt. Es ist also denkbar, daß aus dem Phasenübergang erster Ordnung bei einem endlichen α ein Phasenübergang zweiter Ordnung wird, bei dem D ausgehend von Null kontinuierlich nichtverschwindende Werte annimmt. Weiter stellt sich die Frage, ob es ein kritisches α gibt, bei dem $V^* = 0$ wird, also selbst bei praktisch verschwindender Josephsonkopplung globale Phasenkohärenz auftritt. Wie wir schon diskutiert haben, hängt die Existenz eines Phasenübergangs erster Ordnung damit zusammen, daß die Ableitung der rechten Seite von (4.27) für $D \rightarrow 0$ verschwindet. Zwar werden die Fluktuationen der Phasendifferenzen für $D \rightarrow 0$ immer unendlich groß, sodaß die rechte Seite von (4.27) in diesem Grenzfall immer verschwindet. Deren Ableitung kann jedoch endlich bleiben oder sogar divergieren. Bleibt die Ableitung endlich, so benötigt man eine minimale Josephsonkopplung V_m um globale Phasenkohärenz zu

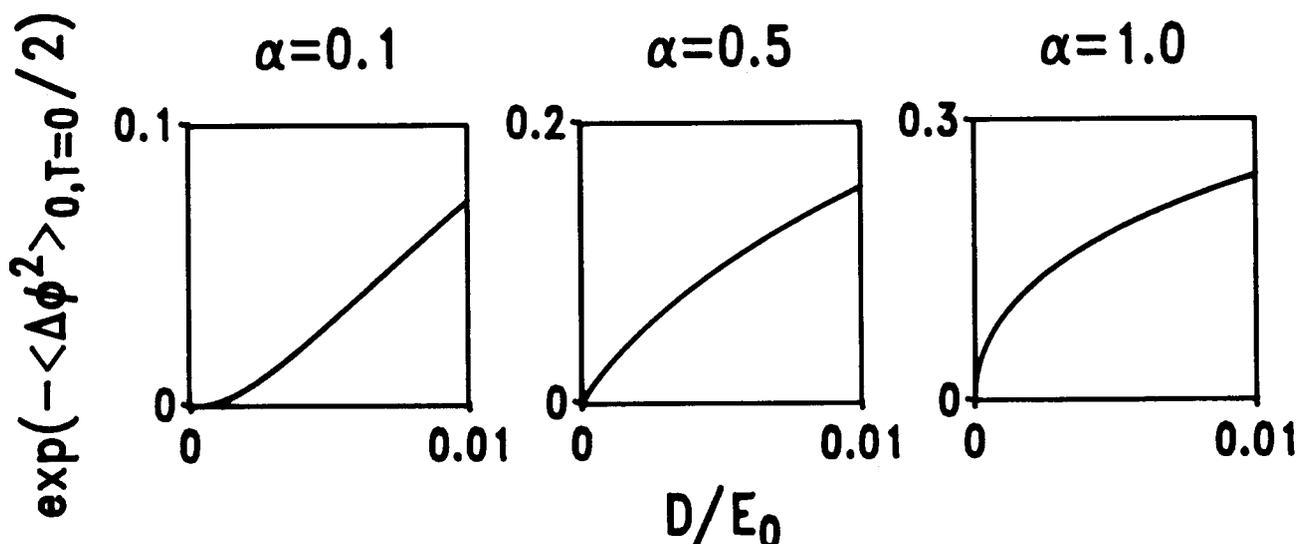


Abb. 8: Rechte Seite der selbstkonsistenten Gleichung (4.27) für $T=0$ und verschiedene Dämpfungsstärken α im zweidimensionalen Fall. Es sind die drei Fälle verschwindender, endlicher und unendlicher Steigung bei $D=0$ realisiert. Die Lösung von (4.27) ergibt sich durch Schnitt dieser Kurven mit einer Geraden der Steigung $1/V$.

erreichen. Es liegt dann jedoch ein Phasenübergang zweiter Ordnung vor. Wird die Ableitung sogar unendlich, so genügt eine beliebig kleine Josephsonkopplung, um globale Phasenkohärenz zu erhalten.

Es zeigt sich, daß für $\alpha=1/d$ gerade der Fall mit endlicher Ableitung für $D \rightarrow 0$ auftritt, der das bereits diskutierte Gebiet $\alpha < 1/d$ von dem Gebiet $\alpha > 1/d$, wo praktisch immer globale Phasenkohärenz auftritt, trennt. Um die Ableitung der rechten Seite von (4.27) für kleine D zu bestimmen, werten wir das Integral (4.34) bis einschließlich Terme der Ordnung Eins aus. Die führenden Terme sind dabei logarithmisch in D . Wir erhalten

$$\langle \Delta \phi^2 \rangle_{0, \tau=0} = \frac{2}{\alpha d} \left[\ln \left(\frac{\alpha^2 E_0}{4\pi^2 D} (k_0 a)^2 \right) - \frac{2}{d} \right] + O(D^{d/2}). \quad (4.45)$$

Damit wird die Selbstkonsistenzbedingung (4.27) für $D \rightarrow 0$

$$\frac{D}{V} = \left[\left(\frac{2\pi}{\alpha k_0 a} \right)^2 \left(\frac{D}{E_0} \right) \right]^{1/\alpha d} \exp \left(\frac{2}{\alpha d^2} \right). \quad (4.46)$$

Wie behauptet findet man für $\alpha=1/d$ die endliche Steigung

$$\left(\frac{2\pi d}{k_0 a}\right)^2 \exp(2/d),$$

während die Steigung für $\alpha < 1/d$ verschwindet und für $\alpha > 1/d$ divergiert. Die kritische Josephsonkopplung V_m ergibt sich aus (4.46) zu

$$\frac{V_m}{E_0} = \left(\frac{k_0 a}{2\pi d}\right)^2 \exp(-2/d) \quad (4.47)$$

wobei speziell

$$\frac{V_m}{E_0} = \frac{1}{4e^2} \quad d=1 \quad (4.48)$$

$$\frac{V_m}{E_0} = \frac{1}{4\pi e} \quad d=2 \quad (4.49)$$

$$\frac{V_m}{E_0} = \frac{(6\pi^2/e)^{2/3}}{36\pi^2} \quad d=3 \quad (4.50)$$

gilt. Damit wissen wir, wie das Temperatur Null-Phasendiagramm aussieht. Ausgehend von $\alpha=0$, $V=V^*$ verläuft eine Phasengrenze erster Ordnung, die bei $\alpha=1/d$, $V=V_m$ mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung in einem trikritischen Punkt endet. Auf der Linie $\alpha=1/d$, $V \leq V_m$ existieren Phasenübergänge zweiter Ordnung. Vergrößert man α , so findet man für alle Josephsonkopplungen globale Phasenkohärenz und damit globale Supraleitung. Unsere Rechnung liefert somit für Temperatur Null einen universellen Wert für den kritischen Widerstand von $R=dR_Q$ sofern V/E_0 nicht zu groß ist, also wenn die Josephsonkopplung nicht zu stark ist und nicht zu große Kapazitäten vorhanden sind. Insbesondere ist in diesem Bereich die Kapazität eine irrelevante Variable. Für schwächere Dämpfung ist die Unterdrückung von Quantenfluktuationen nicht mehr so wirksam. Daher muß dort das Verhältnis V/E_0 vergrößert werden, um globale Supraleitung zu erhalten. Hier tritt somit auch der Wert der Kapazitäten auf. Die senkrechte Linie im Phasendiagramm bei $\alpha=1/d$ erinnert stark an die entsprechende Linie $\alpha=1$ bei einem einzelnen RSJ-Kontakt [27]. Im nächsten

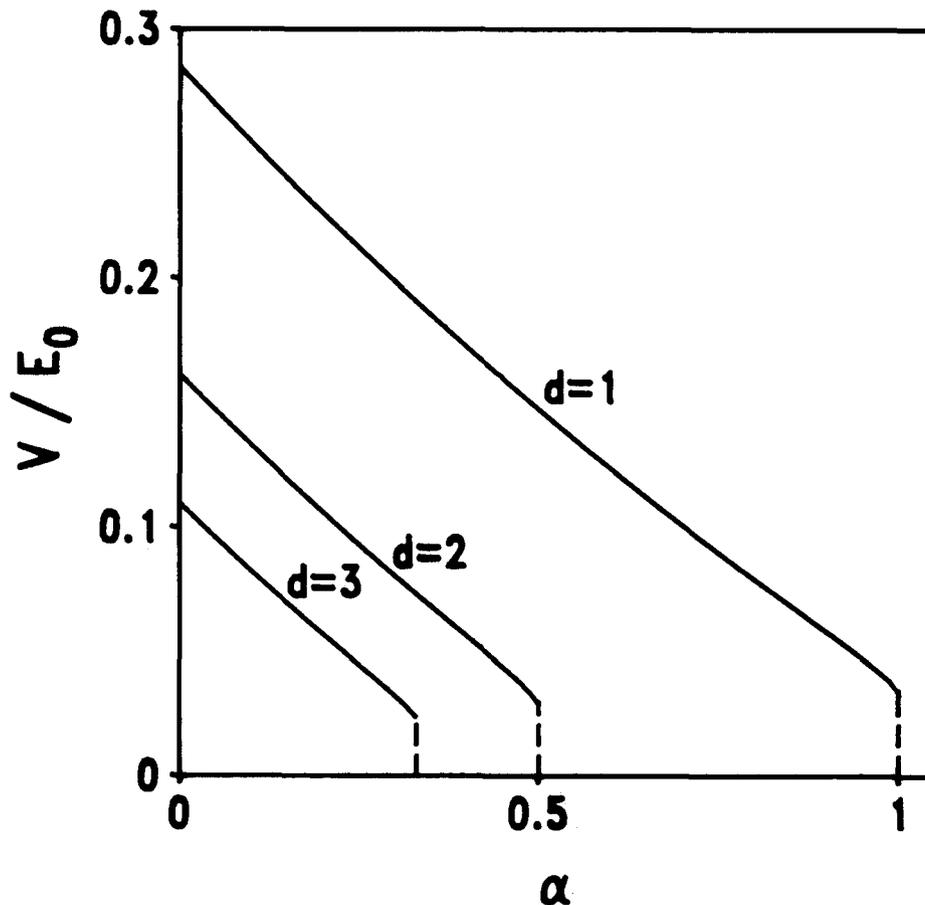


Abb. 9: Temperatur-Null-Phasendiagramm für $d = 1, 2, 3$. Oberhalb der Phasenkurven liegt das Gebiet globaler Supraleitung, während unterhalb Supraleitung nur lokal vorliegt. Die durchgezogenen Kurven geben die Spinodalen der Phasenübergänge erster Ordnung und die gestrichelten Linien geben die Phasenübergänge zweiter Ordnung.

Abschnitt werden wir jedoch sehen, daß sich im Gegensatz zum einzelnen Kontakt auch bei endlichen Temperaturen ein Phasenübergang ergibt.

4.5. Das Phasendiagramm bei endlichen Temperaturen

Für endliche Temperaturen wollen wir den Bereich betrachten, in dem Quanteneffekte eine besondere Rolle spielen. Dies ist der Fall für schwache Kopplung und tiefe Temperaturen. Wir fordern daher für die weitere Rechnung, daß $E_0 \gg 2\pi/\beta, 2\pi D/\alpha$. Ausgangspunkt für die folgende

Diskussion ist der Ausdruck (4.26) für $\langle \Delta\phi^2 \rangle_0$ in Verbindung mit der Selbstkonsistenzgleichung (4.27). Wir bemerken zunächst, daß der von der Ladungsenergie herrührende Term $\hbar^2 \nu_n^2 / E_0$ in (4.26) nur ein Abschneiden der Summe bewirkt. Wir vernachlässigen daher diesen Term und summieren dafür nur bis $n_0 = \beta E_0 / 2\pi$. Wir können nun den Strukturfaktor $S_{\vec{k}}$ kürzen und die Summation über die erste Brillouinzone durchführen. Die Resultate werden somit nicht mehr von der Gitterstruktur abhängen, auch wenn wir nicht die Annahme kleiner Wellenvektoren machen. Der verbleibende Ausdruck

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_0 = \frac{2}{d\alpha} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{1}{n + D\beta/\alpha} \quad (4.51)$$

hat nun große Ähnlichkeit mit dem entsprechenden Resultat für einen einzelnen RSJ-Kontakt. Diese etwas überraschende Beobachtung hängt mit dem speziellen Grenzfall großer Ladungsenergien, der hier betrachtet wird, zusammen. Daß (4.51) für ein Netzwerk abgeleitet wurde, erkennt man schon daran, daß die Dimension d darin auftritt. Da es auch Versuche gibt, die Experimente an granularen Supraleitern mit Hilfe eines einzigen Josephsonkontakts zu erklären [22,61], sei hier nochmals darauf hingewiesen, daß in diesem Fall ein Phasenübergang nur bei $T=0$ auftreten kann. Führt man die Summation in (4.51) unter Berücksichtigung des betrachteten Grenzfalls durch, so erhält man

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_0 = \frac{2}{d\alpha} \left[\ln \left(\frac{\beta E_0}{2\pi} \right) - \Psi \left(\frac{\beta D}{\alpha} \right) \right], \quad (4.52)$$

wobei $\Psi(x)$ die logarithmische Ableitung der Γ -Funktion ist. Für die selbstkonsistente Bedingung (4.27) ergibt sich

$$\frac{D}{V} = \left(\frac{2\pi}{\beta E_0} \right)^{1/d\alpha} \exp \left[\frac{1}{d\alpha} \Psi \left(\frac{\beta D}{\alpha} \right) \right]. \quad (4.53)$$

Ersetzt man die Ψ -Funktion durch ihre asymptotische Entwicklung für große β , also kleine Temperaturen, so findet man

$$D = E_0 \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{1/(\alpha-1)} \left(\frac{V}{E_0} \right)^{\alpha/(\alpha-1)} \quad \alpha > \frac{1}{d} \quad (4.54)$$

$$D = 0 \quad \alpha \leq \frac{1}{d}$$

Damit ist der Phasenübergang zweiter Ordnung bei Temperatur Null und $\alpha=1/d$ aus dem vorhergehenden Abschnitt reproduziert.

Um die Selbstkonsistenzgleichung (4.53) für endliche Temperaturen zu lösen, suchen wir, wie im vorigen Abschnitt für Temperatur Null beschrieben, die Lösung, bei der die linke Seite von (4.53) als Funktion von D eine Tangente zur rechten Seite bildet. Dabei seien die Parameter V , E_0 und α fest, gesucht wird die kritische Temperatur T^* . Die (4.39) entsprechende Gleichung lautet jetzt

$$y_0 \Psi'(y_0) = d\alpha, \quad (4.55)$$

wobei die Abkürzung $y=\beta D/\alpha$ verwendet wurde und y_0 das spezielle y bedeutet, das (4.55) löst. Durch Einsetzen in (4.53) erhalten wir für die kritische Temperatur

$$\frac{k_B T^*}{E_0} = \left[\frac{\alpha y_0}{V/E_0} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/d\alpha} \exp \left(-\frac{1}{d\alpha} \Psi(y_0) \right) \right]^{d\alpha/(1-d\alpha)}. \quad (4.56)$$

Offensichtlich legt auch hier die Ladungsenergie E_0 nur den Energiemaßstab fest, die Kapazität bleibt also im Bereich großer Ladungsenergien bei endlichen Temperaturen eine irrelevante Variable. Um mehr Information über den Verlauf von $T^*(\alpha)$ bei festem V/E_0 zu erhalten, müssen wir (4.55) genauer diskutieren. Wir werden dies für α in der Nähe von $1/d$ und für große α tun.

Wenden wir uns zunächst $\alpha \approx 1/d$ zu. Mit Hilfe der asymptotischen Entwicklung von $\Psi'(y)$ erhalten wir sofort

$$y_0 = \frac{1}{2(d\alpha-1)} \quad \alpha - \frac{1}{d} \ll 1. \quad (4.57)$$

Daraus folgt, daß D bei endlichen Temperaturen am Phasenübergang immer

einen Sprung macht. Wir finden also einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit kontinuierlichem D nur bei $T=0$, $\alpha=1/d$ und $V \leq V_m$. Mit (4.56) und (4.57) ergibt sich die kritische Temperatur $T^*(\alpha)$ zu

$$\frac{k_B T^*}{E_0} = \frac{2d}{e^2} \frac{V}{E_0} (d\alpha - 1) \exp\left[\frac{\ln(2\pi dV/E_0)}{d\alpha - 1}\right] \quad \alpha - \frac{1}{d} \ll 1. \quad (4.58)$$

Für große α geht die Lösung y_0 von (4.55) wie $1/d\alpha$ gegen Null. Entwickelt man die Ψ -Funktion in (4.56) für kleine Argumente, so findet man, daß T^* für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen den konstanten Wert

$$\frac{k_B T^*}{E_0} = \frac{d}{e} \frac{V}{E_0} \quad (4.59)$$

geht und mit der Stärke der Josephsonkopplung skaliert.

Man erhält also in der Nähe von $\alpha=1/d$ einen kurzen Bereich in dem die kritische Temperatur praktisch verschwindet, gefolgt von einem re-

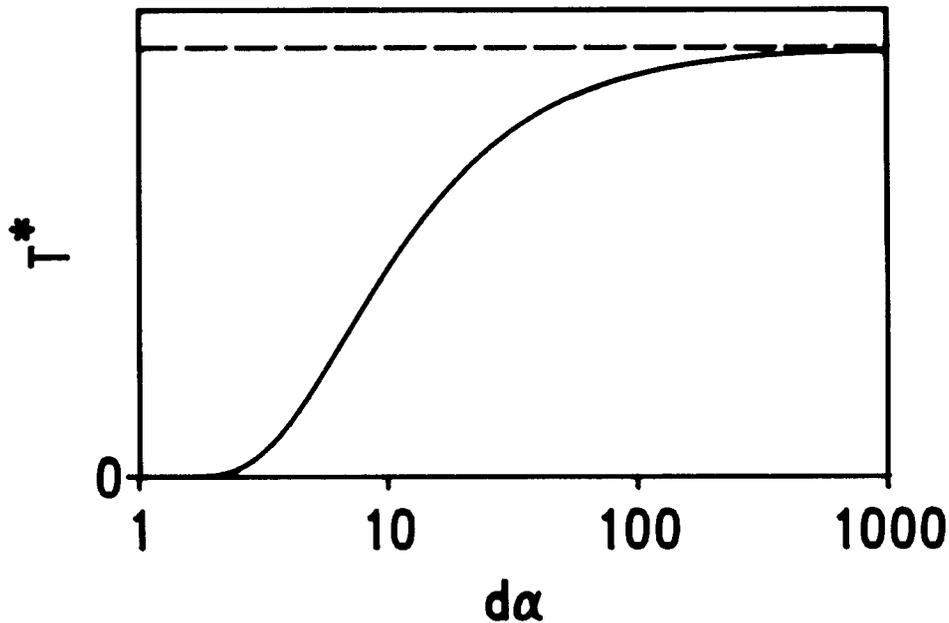


Abb. 10: Kritische Temperatur T^* in willkürlichen Einheiten für $dV/E_0=0.001$ in Abhängigkeit von der Dämpfungsstärke $d\alpha$. Die gestrichelte Linie kennzeichnet die kritische Temperatur dV/eE_0 bei starker Dämpfung. Man beachte den logarithmischen Maßstab für die Dämpfungsstärke.

lativ steilen Anstieg, der für große α schließlich auf den endlichen Grenzwert (4.59) führt.

4.6. Der Einfluß von Unordnung

Die Ableitung des Phasendiagramms in den beiden vorhergehenden Abschnitten wurde für eine regelmäßige Anordnung von Josephsonkontakten durchgeführt. Im Hinblick auf eine mögliche Beschreibung des Minnesota-Experiments entsteht die Frage, wie die Resultate durch die in granularen Systemen vorhandene Unordnung modifiziert werden.

Die Josephsonkopplung und der Widerstand eines Kontakts werden durch ein Tunnelmatrixelement bestimmt, das exponentiell vom Abstand der beiden beteiligten Inseln abhängt. Nimmt man für die Inselabstände eine Gaußverteilung an, so erhält man für die Normalwiderstände R_{ij} und die Josephsonkopplungen V_{ij} sehr breite Verteilungen. Diese Verteilungen hängen über die Relation

$$R_{ij} V_{ij} \sim \Delta \quad (4.60)$$

zusammen [62]. Wir werden nun diese breite Verteilung auf eine schmale Verteilung um einen kritischen Wert zurückführen, wobei wir ein zuerst von Ambegaokar, Halperin und Langer [63] für den Fall der Leitung durch Elektronenhüpfen gegebenes Argument für unser Problem modifizieren.

Wir hatten bereits früher gefordert, daß sich das Netzwerk aus Josephsonkontakten durchgehend von einem Ende der Probe bis zum anderen erstreckt. Betrachten wir das Netzwerk zunächst als klassisches Widerstandsnetzwerk aus dem am Anfang alle Widerstände entfernt seien. Jetzt setzt man, beginnend bei kleinen Widerständen, da diese den größten Strom leiten, die Widerstände nach und nach wieder in das Netzwerk ein. Es gibt dann einen kritischen Widerstand R_c , bei dem das Netzwerk perkoliert, d.h. eine durchgehende Verbindung von einem Ende zum anderen entsteht. Wir ersetzen nun unser ursprüngliches Netzwerk durch ein Netzwerk, das nur noch Widerstände in einem engen Intervall um R_c enthält und eine entsprechend größere Gitterkonstante besitzt. Dabei werden Kontakte mit $R_{ij} \ll R_c$ kurzgeschlossen und der Widerstand von Kontakten mit $R_{ij} \gg R_c$ wird Unendlich gesetzt. Wir müssen jetzt überprüfen, ob dieses Vorgehen entsprechend mit der Josephsonkopplung möglich ist. Zum kritischen Widerstand R_c gehört nach (4.60) eine kritische Kopplung V_c und

kleinen Widerständen entsprechen starke Josephsonkopplungen. Bei starker Kopplung kann man aber die Fluktuationen der Phasendifferenz vernachlässigen und den Kontakt in Übereinstimmung mit der Diskussion der Widerstände durch einen supraleitenden Draht ersetzen. Im Fall $V_{ij} \ll V_c$ kann man wegen der großen Fluktuationen der Phasendifferenz die Kopplung vernachlässigen und erhält so tatsächlich ein Netzwerk bestehend aus RSJ-Kontakten, deren Widerstände und Josephsonkopplungen in einem schmalen Bereich um einen kritischen Wert liegen. Da auf der Linie mit Phasenübergängen zweiter Ordnung eine divergierende Korrelationslänge vorliegt, werden wir erwarten, daß die schwache Unordnung zwar die Lage dieser Linie verschieben, nicht aber ihre Existenz beeinflussen kann.

Somit ist gezeigt, daß wir im Rahmen unseres Modells auch für ein ungeordnetes System bei großen Ladungsenergien einen Phasenübergang finden, der nur durch den Normalwiderstand bestimmt wird, über dessen genaue Lage wir, im Gegensatz zum Fall eines geordneten Netzwerks jedoch nichts aussagen können.

4.7. Weitere Überlegungen zum Phasendiagramm und Ausblick

In diesem Abschnitt wollen wir noch einige Ergebnisse beschreiben, die näheren Aufschluß über das Phasendiagramm geben und über die in dieser Arbeit vorgestellte Variationsrechnung hinausgehen. Eine ausführliche Darstellung findet man in Referenz 54. Unser Modell (4.14) ist sehr eng mit dem XY-Modell verknüpft. Das XY-Modell beschreibt Spins auf einem d-dimensionalen Gitter, die sich in einer Ebene drehen können. Die Wechselwirkung von nächsten Nachbarn auf dem Gitter wird durch den Hamiltonoperator

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (4.61)$$

beschrieben, wobei $|\vec{S}_i|=1$ angenommen wurde und die Kopplung J positiv sei. Die Stellung ϕ_i der Spins bezüglich einer festen Achse entspricht der Phase ϕ_i auf einer supraleitenden Insel. In diesem Modell sind zwei Arten von Anregungen möglich. Spinwellen sind für einen Phasenübergang in diesem System unbedeutend, sie zerstören sogar die langreichweitige Ordnung. Dennoch gibt es einen Phasenübergang, der mit der zweiten Art

von Anregungen zusammenhängt. Diese Vortices sind topologische Anregungen, die durch eine Windungszahl charakterisiert sind. Beim Umlauf um den Kern dreht sich die Phase um ein Vielfaches von 2π . Da die Energie eines einzelnen Vortex logarithmisch mit der Größe des Systems divergiert, gibt es bei tiefen Temperaturen nur Vortex-Antivortex-Paare, deren Energie logarithmisch mit ihrem Abstand geht. Bei einer bestimmten Temperatur, die von der Kopplungskonstanten J abhängt, kommt es zum Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang [64], bei dem die Paare in einzelne Vortices dissoziieren.

Unser Modell (4.14) stimmt mit dem d -dimensionalen XY-Modell überein, wenn man voraussetzt, daß keine Dissipation auftritt ($\alpha=0$) und die Temperatur hoch ist. Damit sollte für granulare Supraleiter im klassischen Bereich der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang auftreten, was auch experimentell gefunden wird [65]. Bei Erniedrigung der Temperatur muß man den Anteil der kinetischen Energie berücksichtigen. Da dieser sich als XY-Modell-artiger Beitrag in Zeitrichtung schreiben läßt, erwartet man, daß sich unser System bei Temperatur Null ohne Dissipation wie ein $(d+1)$ -dimensionales XY-Modell verhält. Bei endlichen Temperaturen ist die Ausdehnung des Systems in Zeitrichtung endlich und das Verhalten nahe dem Phasenübergang sollte wieder das des klassischen d -dimensionalen Modells sein, wobei die Parameter durch den kinetischen Term jedoch renormiert werden können. Nehmen wir jetzt einen schwachen dissipativen Anteil hinzu ($\alpha \ll 1$), so werden wir wegen des eben gegebenen Arguments folgern, daß unser Modell für endliche Temperaturen immer noch in der Universalitätsklasse des d -dimensionalen XY-Modells ist. Für Temperatur Null ist dies nicht mehr der Fall, da zum $(d+1)$ -dimensionalen XY-Modell eine langreichweitige Wechselwirkung proportional $1/t^2$ in der jetzt unendlich ausgedehnten Zeitrichtung hinzukommt.

Für sehr starke Dissipation ($\alpha \gg 1$) kostet eine zeitliche Veränderung der Phasen sehr viel Wirkung. Durch Renormierungsüberlegungen findet man [54], daß dieser Fall dem klassischen XY-Modell bei der physikalischen Temperatur und einer durch Quantenfluktuationen etwas reduzierten Kopplungskonstanten entspricht. Für sehr große α ist dieses Verhalten konsistent mit dem, was man aus der Variationsrechnung erhält.

Auch im Bereich $V \ll E_0$ läßt sich das durch die Variationsrechnung erhaltene Phasendiagramm durch Renormierungsgruppenrechnungen bestätigen. Insbesondere findet man für $T=0$ einen Phasenübergang bei $\alpha=1/d$.

Für Temperatur Null läßt sich jedoch auch zeigen, daß es für alle Werte für V/E_0 einen Phasenübergang geben sollte, der bei $1/d \leq \alpha \leq 1$ liegt [54]. Bei diesen Überlegungen spielen im Bereich $V \gg E_0$ Phasensprünge um 2π auf einzelnen Inseln eine wichtige Rolle. Man findet, daß hier nur die Kopplung in der Zeitrichtung von Bedeutung ist. Damit reduziert sich das Problem auf das eines Teilchens im eindimensionalen periodischen Potential, von dem man weiß, daß für $T=0$ ein Phasenübergang bei $\alpha=1$ stattfindet. Bei endlichen Temperaturen tritt dieser Phasenübergang wegen der Eindimensionalität in Übereinstimmung mit der Variationsrechnung nicht mehr auf. Die Diskrepanz zwischen der Variationsrechnung und der Abschätzung von Fluktuationen liegt wohl darin begründet, daß wir in der Variationsrechnung große Fluktuationen von der Ordnung 2π ausgeschlossen haben.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß wir gezeigt haben, daß Dissipation eine wesentliche Rolle für das Verhalten eines Netzwerks bestehend aus RSJ-Kontakten spielt. Inwieweit dieses Modell auf die granularen Supraleiter anwendbar ist, läßt sich zur Zeit nicht mit Sicherheit sagen. Weitere Informationen könnten hier detailliertere, theoretische Untersuchungen, insbesondere auch der Temperaturabhängigkeit des Widerstands, wie sie kürzlich mit einem phänomenologischen Ginzburg-Landau-Ansatz gemacht wurden [53], liefern. Experimentell würden beispielsweise Untersuchungen der Proben im Magnetfeld zusätzliche Aussagen über deren mikroskopische Struktur erlauben. Dies könnte auch dazu beitragen, die Unterschiede zwischen den Experimenten der Minnesota-Gruppe und den Experimenten bei Bell Labs [66] zu erklären. Die $R(T)$ -Kurven der zweiten Gruppe sind zwar qualitativ in Übereinstimmung mit denen der ersten Gruppe, es gibt jedoch keinen Hinweis auf einen universellen Widerstand bei dem globale Supraleitung einsetzt. Man muß davon ausgehen, daß zur vollständigen Erklärung der Experimente auch Lokalisierungseffekte zu berücksichtigen sind [24,66,67]. Zur Überprüfung unserer Theorie würden natürlich besonders Experimente an regelmäßigen Netzwerken beitragen, bei denen der Dissipationsmechanismus besser kontrollierbar wäre als in den granularen Systemen. Leider hat das Interesse an diesen Fragen im Zeitalter der Hochtemperatursupraleiter etwas nachgelassen, so daß die Entwicklung auf diesem Gebiet etwas verzögert wird.

5. Quantenmechanische Brownsche Bewegung

In diesem Kapitel beginnen wir mit der Anwendung von Realzeitfunktionalintegralen auf dissipative Quantensysteme. Das physikalisch einfachste System mit Dissipation ist das freie Brownsche Teilchen, das auf Grund des fehlenden Potentials sehr unterschiedliches Verhalten in Abhängigkeit vom angekoppelten Wärmebad zeigt. Betrachtet werden sollen insbesondere die Diffusion des Brownschen Teilchens und das Zerfließen von Wellenpaketen. Interessant ist dabei, daß das freie Teilchen unter bestimmten Umständen sogar lokalisiert sein kann. Hier läßt sich die Verbindung zu einem Teilchen im periodischen Potential herstellen.

Ausgangspunkt der Diskussion wird jedoch nicht die direkte Berechnung der Dynamik des freien Teilchen sein. Wir wollen vielmehr kurz die Theorie für ein harmonisch gebundenes Teilchen skizzieren, da daraus sowohl das freie Teilchen als auch die parabolische Barriere abgeleitet werden können.

5.1. Der gedämpfte harmonische Oszillator

Den an ein Wärmebad gekoppelten harmonischen Oszillator modellieren wir mit Hilfe der Lagrangefunktion (2.20-23), wobei wir für das Potential

$$V(q, s) = \frac{1}{2} M \omega_0^2 q^2 \quad (5.1)$$

setzen. Aus diesem Modell läßt sich das freie Teilchen durch den Grenzübergang $\omega_0 \rightarrow 0$ erhalten. Auch die parabolische Barriere mit Barrierenfrequenz ω_b ist darin enthalten wenn man $\omega_0 = i\omega_b$ setzt. Wie in Kapitel 2 beschrieben, kann man die Badfreiheitsgrade eliminieren. Man erhält dann für die Zeitentwicklung der Dichtematrix die Ausdrücke (2.60-62) wobei das Potential (5.1) einzusetzen ist. Um die effektive Wirkung $\Sigma[x, r, \bar{q}]$ zu bestimmen, muß man die Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen (2.63-65) aufsuchen. Wir wollen hier nicht auf die Details der Rechnung eingehen, da diese in anderen Arbeiten [25,26] bereits ausführlich beschrieben wurden. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß die Bewegungsgleichungen auf Grund des harmonischen Potentials linear sind und sich somit exakt lösen lassen. Einsetzen der Lösungen in (2.62) liefert dann

für die propagierende Funktion

$$J(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = \frac{1}{4\pi|A(t)|} \left(\frac{M}{2\pi\hbar\Lambda} \right)^{1/2} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) \right) \quad (5.2)$$

mit der effektiven Wirkung

$$\begin{aligned} \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = & i \left(\frac{M}{2\Lambda} \bar{r}^2 + \frac{M\Omega}{2} \bar{x}^2 \right) \\ & + (x_i r_i + x_f r_f) M \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} + x_i r_f \frac{\hbar}{2A(t)} - x_f r_i \frac{2M^2}{\hbar} \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}^2(t)}{A(t)} \right) \\ & + x_i \bar{r} \left(-M \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \frac{M}{2\Lambda} \frac{S(t)}{A(t)} \right) + i x_i \bar{x} \left(-M\Omega + \frac{M}{2} \frac{\dot{S}(t)}{A(t)} \right) \\ & + x_f \bar{r} \left[\frac{2M^2}{\hbar} \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}^2(t)}{A(t)} \right) + \frac{M^2}{\hbar\Lambda} \left(\dot{S}(t) - \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} S(t) \right) \right] \\ & + i x_f \bar{x} \frac{M^2}{\hbar} \left[\dot{S} \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \dot{S}(t) \right] \quad (5.3) \\ & + i x_i^2 \left[\frac{M\Omega}{2} - \frac{M}{2} \frac{\dot{S}(t)}{A(t)} + \frac{\hbar^2 \Lambda}{8M A^2(t)} \left(1 - \frac{M^2 S^2(t)}{\hbar^2 \Lambda^2} \right) \right] \\ & + i x_i x_f \left[-\frac{M^2}{\hbar} \left(\dot{S}(t) \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \dot{S}(t) \right) \right. \\ & \left. + \frac{\hbar\Lambda}{2A^2(t)} \left(\dot{A}(t) \left(1 - \frac{M^2 S^2(t)}{\hbar^2 \Lambda^2} \right) + A(t) \frac{M^2 S(t) \dot{S}(t)}{\hbar^2 \Lambda^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir eine ganze Reihe neuer Funktionen eingeführt, die wir im folgenden angeben und ihre physikalische Bedeutung für den gedämpften harmonischen Oszillator diskutieren wollen.

Die Funktion Λ ist gegeben durch die unendliche Summe

$$\Lambda = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\nu_n^2 + \zeta_n + \omega_0^2}, \quad (5.4)$$

wobei in ζ_n gemäß (2.58) der Dämpfungskern eingeht. Den Nenner in (5.4) kennen wir schon von der Imaginärzeitrechnung für das metastabile Potential in Kapitel 3. Dies ist verständlich, da oberhalb der crossover-Temperatur die Zerfallsrate unter anderem durch lokale Eigenschaften der Mulde, also die harmonische Näherung an dieser Stelle, bestimmt ist. In Abschnitt 2.4. wurde beschrieben, wie man die Gleichgewichts-Korrelationsfunktion $\langle A(t)B(0) \rangle_\beta$ berechnen kann, wobei A und B zwei Operatoren seien, die Observablen zugeordnet sind. Mit Hilfe von (5.2) und (5.3) findet man, daß Λ mit der Ortsautokorrelationsfunktion gemäß

$$\Lambda = \frac{M}{\hbar} \langle q(0)q(0) \rangle_\beta \quad (5.5)$$

verknüpft ist. Diese Interpretation ist jedoch nur für den harmonischen Oszillator möglich. Für das freie Teilchen und die parabolische Barriere existiert $\langle q^2 \rangle_\beta$ nicht. Beim freien Teilchen divergiert diese Größe wegen des fehlenden Potentials. Man kann aber eine zu $\langle q^2 \rangle_\beta$ analoge, geeignete Funktion finden. Für $\omega_0 = i\omega_b$ läßt sich die Größe Λ zwar analytisch fortsetzen, was wir im Kapitel 6 ausnützen werden, ihre Interpretation als Korrelation ist jedoch nicht mehr sinnvoll.

Auch Ω , das durch die Summe

$$\Omega = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\zeta_n + \omega_0^2}{\nu_n^2 + \zeta_n + \omega_0^2} \quad (5.6)$$

gegeben ist, läßt sich mit einer Autokorrelationsfunktion in Verbindung bringen, und zwar der des Impulses. Man findet

$$\Omega = \frac{\langle p(0)p(0) \rangle_\beta}{M\hbar}. \quad (5.7)$$

Setzt man für den Fall ohmscher Dämpfung $\zeta_n = \gamma |\nu_n|$, so stellt man fest, daß die Summe (5.6) divergiert. Der Grund dafür ist, daß bei ohmscher Dämpfung kein Gedächtnis vorhanden ist. Diese Markov-Annahme ist verantwortlich für die Divergenz, die jedoch durch das Einführen einer Hochfrequenzabschneidefunktion für $\hat{\gamma}(z)$ regularisiert werden kann.

Die Funktionen $A(t)$ und $S(t)$ besitzen die Laplace-Transformierten

$$\hat{A}(z) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z) + \omega_0^2} \quad (5.8)$$

und

$$\hat{S}(z) = \frac{2}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{z}{z^2 - \nu_n^2} [\hat{A}(z) - \hat{A}(|\nu_n|)]. \quad (5.9)$$

Durch Vergleich von (5.8) mit der klassischen Bewegungsgleichung (2.19) für harmonisches Potential (5.1) zeigt sich, daß $A(t)$ im wesentlichen die Greensche Funktion von (2.19) oder die zugehörige Antwortfunktion $\chi(t)$ ist. Es gilt der Zusammenhang

$$A(t) = -\frac{\hbar}{2} \chi(t). \quad (5.10)$$

Für den harmonischen Oszillator ist $A(t)$ gerade der Imaginärteil der Orts-Orts-Korrelationsfunktion $\langle q(t)q(0) \rangle_\beta$. Die Antwortfunktion $\chi(t)$ ist temperaturunabhängig und somit immer klassisch.

Für die Funktion $S(t)$ kann man zeigen, daß sie beim harmonischen Oszillator gerade den symmetrischen Anteil von $\langle q(t)q(0) \rangle_\beta$ ergibt. Dieser hängt, im Gegensatz zu $A(t)$, sehr wohl von der Temperatur ab und zeigt Quanteneffekte. So ist das Langzeitverhalten für ohmsche Dämpfung bei hohen Temperaturen exponentiell abfallend, wobei die Zeitskala durch die Dämpfungskonstante γ gegeben ist. Bei tieferen Temperaturen bestimmt die erste Matsubara-Frequenz ν_1 den exponentiellen Abfall während bei Temperatur Null der Zerfall der Korrelation nur noch algebraisch $\sim 1/t^2$ erfolgt [68]. Das Temperatur Null-Verhalten ist auch bei endlichen, nicht zu hohen Temperaturen von Bedeutung, da es dort in einem mittleren Zeitbereich beobachtbar ist [69,70]. Entsprechendes gilt auch für die

Temperatur Null-Ergebnisse für das freie Teilchen, die wir später diskutieren werden. Des weiteren lassen sich bereits in der Funktion $S(t)$ des harmonischen Oszillators Eigenschaften des freien gedämpften Teilchens feststellen. Im Fall starker Dämpfung spürt das Teilchen nämlich zunächst gar kein Potential [69].

Wir sind also in der Lage, alle in (5.3) auftretenden Größen als Gleichgewichtskorrelationen des harmonischen Oszillators zu interpretieren. Damit ist auch die zeitliche Entwicklung von Nichtgleichgewichtszuständen vollständig durch die Präparationsfunktion und diese Korrelationen bestimmt. Wie wir es für einen Gaußprozeß erwarten, genügt es, die Zweierkorrelationen zu kennen, da sich höhere Korrelationen durch diese ausdrücken lassen [71].

Abschließend sei noch festgehalten, daß man zeigen kann, daß ein anfänglicher Nichtgleichgewichtszustand des gedämpften harmonischen Oszillators für lange Zeiten immer gegen den Gleichgewichtszustand ρ_β geht [25,26]. Wie wir sehen werden, ist dies beim freien Teilchen wegen des fehlenden Potentials nicht mehr notwendigerweise der Fall. Das fehlende Potential macht also mit den besonderen Reiz des freien gedämpften Teilchens aus. Wir wollen daher im nächsten Abschnitt den Grenzübergang $\omega_0 \rightarrow 0$ durchführen.

5.2. Die Korrelationsfunktionen des freien Brownschen Teilchens

Für den Rest dieses Kapitels betrachten wir ein Teilchen das gemäß (2.20-23) an ein Wärmebad gekoppelt ist, jedoch keiner äußeren Kraft auf Grund eines Potentials ausgesetzt ist. Wir setzen in (2.21) also $V(q,s)=0$. Wählt man dann speziell für die Kopplungskonstante

$$c_n = m_n \omega_n^2, \quad (5.11)$$

wie es zuerst von Hakim und Ambegaokar [28] für das freie Brownsche Teilchen gemacht wurde, so läßt sich die Lagrangefunktion des Gesamtsystems

$$\mathcal{L} = \frac{M}{2} \dot{q}^2 + \sum_{n=1}^N \frac{m_n}{2} \dot{x}_n^2 - \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 (x_n - q)^2 \quad (5.12)$$

translationsinvariant schreiben. Hier sieht man, daß es wichtig war, die Potentialrenormierung in (2.23) zu kompensieren. Andernfalls würde sich das freie Teilchen in einem durch die Badoszillatoren geschaffenen, harmonischen Potential bewegen. In (5.11) haben wir eine spezielle Wahl der Kopplungskonstanten c_n getroffen. Wir dürfen dies ohne Beschränkung der Allgemeinheit tun, da sich durch Wahl der Massen m_n zu den jeweiligen Frequenzen ω_n nach (2.25) immer noch jede beliebige spektrale Baddichte modellieren läßt.

Ausgehend von der Lagrangefunktion (5.12) könnte man die Badfreiheitsgrade eliminieren und die Dynamik des freien Brownschen Teilchens direkt berechnen. Äquivalent dazu ist der Grenzübergang $\omega_0 \rightarrow 0$ in der propagierenden Funktion (5.2) des harmonischen Oszillators.

Wenn nichts anderes gesagt wird, beziehen sich die Bezeichnungen Λ , Ω , S und A im folgenden immer auf die betreffenden Größen für das freie Problem, der Grenzübergang sei also immer schon durchgeführt, sofern er nicht noch explizit angegeben ist.

Wie wir schon beim harmonischen Oszillator erläutert haben, divergiert die Ortsautokorrelationsfunktion des freien Brownschen Teilchens. Mathematisch verantwortlich dafür ist der $n=0$ -Term in der Summe (5.4), so daß wir formal schreiben können

$$\langle q^2 \rangle_\beta = \frac{2}{M\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\nu_n^2 + \zeta_n} + \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \frac{1}{M\beta\omega_0^2}. \quad (5.13)$$

Die gleiche Divergenz tritt auch in der Orts-Orts-Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} \hat{S}(z) = \frac{4}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z}{z^2 - \nu_n^2} \left[\hat{A}(z) - \hat{A}(\nu_n) \right] - \frac{1}{M\beta z} \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z)} \\ + \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \frac{1}{M\beta z \omega_0^2} \end{aligned} \quad (5.14)$$

auf. Der Ausweg ist, eine dem freien Teilchen angemessene Größe zu definieren. Das Teilchen kann sich anfänglich an einem beliebigen Ort $q(0)$ aufhalten, der nicht durch ein Potential beschränkt ist. Es interessiert

uns dann eigentlich nur, wie sich das Teilchen im Laufe der Zeit von diesem Ort entfernt. Wir definieren deshalb das mittlere Verschiebungsquadrat

$$s(t) = \langle (q(t) - q(0))^2 \rangle_{\beta}, \quad (5.15)$$

das mit dem symmetrischen Anteil der Verschiebungskorrelationsfunktion

$$Q(t) = \frac{1}{2} \langle (q(t) - q(0))q(0) + q(0)(q(t) - q(0)) \rangle_{\beta} = S(t) - \langle q^2 \rangle_{\beta} \quad (5.16)$$

über

$$s(t) = -2Q(t) \quad (5.17)$$

zusammenhängt. Wir werden im weiteren also statt der Funktion $S(t)$ die Korrelation $Q(t)$ verwenden.

In der Impulsautokorrelationsfunktion läßt sich der Grenzübergang $\omega_0 \rightarrow 0$ ohne Schwierigkeiten durchführen und man erhält

$$\langle p^2 \rangle_{\beta} = \frac{M}{\beta} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hat{\gamma}(\nu_n)}{\nu_n + \hat{\gamma}(\nu_n)} \right]. \quad (5.18)$$

Der erste Term ist der klassische Anteil $Mk_B T$, der zweite Term gibt die Quantenkorrekturen und geht für verschwindende Dämpfung gegen Null. In diesem Fall verschwindet die Impulsvarianz wenn die Temperatur gleich Null wird, so daß der Impuls Null-Grundzustand des freien, ungedämpften Teilchens erreicht wird.

Die Funktion $A(t)$ wird im Limes $\omega_0 \rightarrow 0$ bestimmt durch ihre Laplace-Transformierte

$$\hat{A}(z) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z)}. \quad (5.19)$$

Obwohl $A(t)$ der antisymmetrische Teil der Orts-Orts-Korrelationsfunktion ist, gibt es hier keine Schwierigkeiten, da diese zur Zeit $t=0$ ver-

schwindet.

Wir könnten jetzt den Übergang $\omega_0 \rightarrow 0$ in der propagierenden Funktion durchführen. Wir benötigen diese aber erst, um die Dynamik von Nichtgleichgewichtszuständen zu untersuchen und verschieben diese Rechnung daher auf einen späteren Abschnitt. Zunächst wollen wir die Zeitabhängigkeit der Korrelationen, die ja wesentlich das Verhalten der propagierenden Funktion bestimmen, genauer betrachten. Für einen allgemeinen Dämpfungskern $\gamma(t)$ ist die Berechnung der Korrelationen nicht für alle Zeiten geschlossen möglich. Eine Ausnahme bildet die ohmsche Dämpfung, die schon von Hakim und Ambegaokar [28] für nichtfaktorisierte Anfangsbedingungen betrachtet wurde. Im nächsten Abschnitt werden wir diesen Spezialfall diskutieren und anschließend das Langzeitverhalten der Korrelationen für den allgemeineren Fall frequenzabhängiger Dämpfung untersuchen.

5.3. Die Korrelationsfunktionen für ohmsche Dämpfung

Für den Fall ohmscher, also frequenzunabhängiger Dämpfung

$$\hat{\gamma}(z) = \gamma \quad (5.20)$$

lassen sich eine Reihe von geschlossenen Ausdrücken für die im vorigen Abschnitt diskutierten Korrelationsfunktionen finden. Beginnen wir mit der antisymmetrischen Orts-Orts-Korrelationsfunktion. Einsetzen von (5.20) in (5.19) und Laplace-Rücktransformation liefert sofort

$$A(t) = -\frac{\hbar}{2M\gamma} [1 - \exp(-\gamma t)]. \quad (5.21)$$

Da dieses klassische Resultat nach (5.10) für $t \geq 0$ im wesentlichen die Antwortfunktion des freien gedämpften Teilchens ist, können wir hieraus etwas über dessen Verhalten unter dem Einfluß einer äußeren Kraft erfahren. Die Antwortfunktion $\chi(t)$ beschreibt gemäß ihrer Definition

$$\langle q \rangle_t = \int_0^t ds \chi(t-s) F(s) \quad (5.22)$$

die Antwort des Ortes auf eine äußere Kraft $F(s)$, die seit der Zeit $t=0$

wirkt. Wenn die Kraft zeitlich konstant ist, erhält man für die Antwort des Impulses

$$\langle p \rangle_t = \frac{F}{M\gamma} [1 - \exp(-\gamma t)]. \quad (5.23)$$

Nachdem das Teilchen also anfänglich durch die Kraft beschleunigt wird, erreicht es auf einer durch die Dämpfung gegebenen Zeitskala γ^{-1} die Driftgeschwindigkeit $F/M\gamma$.

Aus dem Verhalten der Verschiebungskorrelation $Q(t)$ lernen wir etwas darüber, wie sich das Brownsche Teilchen von seinem Ausgangspunkt entfernt und damit über dessen diffusives Verhalten. Aus (5.13) und (5.14) erhält man mit (5.16) die Laplace-Transformierte $\hat{Q}(z)$, die sich nach einer Partialbruchzerlegung leicht rücktransformieren läßt. Da die dabei auftretenden Pole sowohl von der Dämpfungsstärke γ als auch von den Matsubarafrequenzen ν_n abhängen, findet man neben Termen, die auf der Zeitskala γ^{-1} abfallen auch Quantenkorrekturterme, die auf der Zeitskala ν_n^{-1} abfallen. Außerdem gibt es noch einen Pol bei $z=0$ der für den klassischen Diffusionsterm verantwortlich ist. Nach der Rücktransformation erhält man

$$Q(t) = -\frac{1}{M\beta\gamma}t + \frac{1}{m\beta\gamma^2} - \frac{2}{M\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\nu_n^2 + \nu_n\gamma} \quad (5.24)$$

$$-\frac{\hbar}{2M\gamma} \cot\left(\frac{\hbar\beta\gamma}{2}\right) \exp(-\gamma t) + \frac{2\gamma}{M\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-\nu_n t)}{\nu_n(\gamma^2 - \nu_n^2)}.$$

Im klassischen Limes überleben die ersten zwei Terme. Der erste Term ist derjenige, der den Langzeitlimes dominiert. Damit ist die Diffusion bei endlichen Temperaturen für $t \rightarrow \infty$ immer klassisch, Quantenkorrekturen spielen in diesem Bereich keine Rolle. Aus (5.24) folgt, daß das Quadrat der Entfernung des freien Brownschen Teilchens von seinem Ausgangspunkt für lange Zeiten linear mit der Zeit anwächst. Liegt dieses diffusive Verhalten vor, so definiert man die Diffusionskonstante

$$D = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} s(t) = -\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} Q(t), \quad (5.25)$$

die angibt, wie schnell das Teilchen diffundiert. Aus (5.24) folgt sofort die Einstein-Relation

$$D = \frac{k_B T}{M\gamma}, \quad (5.26)$$

die eine Folge des Fluktuations-Dissipations-Theorems [32,72] ist. Aus (5.23) und (5.26) folgt, daß unser Modell mit ohmscher Dämpfung gerade das Brownsche Teilchen beschreibt, das in der klassischen statistischen Mechanik betrachtet wird.

Während bei endlichen Temperaturen das Langzeitverhalten klassisch ist, ist dies für $T=0$ nicht mehr der Fall. Genauso wie man beim harmonischen Oszillator einen algebraischen anstelle eines exponentiellen Zerfalls erhält, findet man auch hier ein anderes Zeitverhalten, das davon herrührt, daß aus der Summe über die Matsubarafrequenzen in (5.24) ein Integral wird. Für die Verschiebungskorrelation $Q_0(t)$ bei $T=0$ ergibt sich dann ein Integral über Exponentialintegralfunktionen. Für lange Zeiten erhält man daraus

$$Q_0(t) \sim -\frac{\hbar}{\pi M \gamma} \log(\gamma t) \quad t \rightarrow \infty. \quad (5.27)$$

Das Brownsche Teilchen entfernt sich also nicht mehr diffusiv von seinem Anfangsort sondern langsamer. Dies ist nicht überraschend, da das Teilchen bei Temperatur Null nicht mehr durch thermische Fluktuationen vorangetrieben wird. Dieses logarithmische Verhalten läßt sich bei endlichen, nicht zu hohen Temperaturen in einem mittleren Zeitbereich beobachten. Des weiteren tritt es auch beim überdämpften Oszillator bei Temperatur Null auf, solange der Oszillator das Potential noch nicht spürt [69].

Als letztes wollen wir noch kurz die Impuls-Autokorrelationsfunktion $\langle p^2 \rangle_\beta$ diskutieren. Für rein ohmsche Dämpfung divergiert diese, wie schon beim harmonische Oszillator, als Folge der Markov-Eigenschaft. Auch beim

freien Teilchen kann man den Ausdruck regularisieren, wenn man ohmsche Dämpfung mit einer Hochfrequenzabschneidefunktion verwendet, also beispielsweise den Dämpfungskern $\hat{\gamma}(z)$ des Drude-Modells (3.27) in (5.18) einsetzt. Diese Ultraviolettdivergenz ist zu unterscheiden von der Divergenz, die durch das fehlende Potential bei niedrigen Frequenzen zum Beispiel bei $\langle q^2 \rangle_\beta$ entsteht.

5.4. Langzeitverhalten der Korrelationen bei frequenzabhängiger Dämpfung

Für den Fall frequenzabhängiger Dämpfung kann man im allgemeinen nur Aussagen über die Korrelationsfunktionen bei langen Zeiten machen. Da das Langzeitverhalten einer Funktion durch ihre Laplace-Transformierte bei Argumenten mit kleinem Realteil bestimmt ist, genügt es, die spektrale Dichte bei kleinen Frequenzen zu spezifizieren. Wir wollen im weiteren eine Klasse von Wärmebädern untersuchen, bei denen die niederfrequente spektrale Dichte durch das Potenzgesetz

$$I(\omega) = M\gamma_s \omega^s \quad \omega \ll \omega_c, \quad s > 0 \quad (5.28)$$

gegeben ist. Im Abschnitt 2.3. hatten wir gesehen, daß sich damit eine ganze Reihe von praktischen Problemen beschreiben läßt. Für ein realistisches Modell muß die spektrale Dichte für große Frequenzen gegen Null gehen, so daß der Ansatz (5.28) nur unterhalb einer Abschneidefrequenz gültig ist. Wenn die Beschränkung auf das Niederfrequenzverhalten sinnvoll sein soll, dann dürfen die Ergebnisse nicht von der speziellen Form der Hochfrequenzabschneidefunktion abhängen. Für zwei Fälle, das scharfe Abschneiden und das Drude-Modell, in denen man die Rechnung explizit durchführen kann, erhält man in der Tat übereinstimmende Resultate. Globale Eigenschaften der spektralen Dichte gehen bei Betrachtung von Zeiten $t \gg \omega_c^{-1}$ abgesehen von einer Ausnahme, die wir auf Seite 100 besprechen werden, nur über eine renormierte Masse M_r des Brownschen Teilchens ein. Das qualitative Verhalten ist jedoch unabhängig von deren Wert.

Durch Laplace-Transformation von (2.27) erhält man die Beziehung

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{1}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{I(\omega)}{\omega} \frac{2z}{\omega^2 + z^2}, \quad (5.29)$$

mit deren Hilfe man aus der spektralen Dichte (5.28) die Laplace-Transformierte des Dämpfungskerns bestimmen kann. Für niedrige Frequenzen ergibt sich [73,74]

$$\hat{\gamma}(z) = \begin{cases} \frac{\gamma_s}{\sin(\pi s/2)} z^{s-1} \left[1 + O\left(\frac{z}{\omega_c}, \left(\frac{z}{\omega_c}\right)^{2-s}\right) \right] & 0 < s < 2 \\ \frac{\gamma_2}{\pi} z \ln\left(1 + \frac{\omega_c^2}{z^2}\right) & s=2 \\ \left(\frac{M_r}{M} - 1\right) z \left[1 - \frac{\pi(s-2)/2}{\sin(\pi(s-2)/2)} z^{s-2} + O(z^2, z^s) \right] & s > 2. \end{cases} \quad (5.30)$$

Im Fall $s > 2$ haben wir die zweite Ordnung noch angegeben, da sie für die spätere Rechnung benötigt wird. Wie man durch Vergleich der Terme z^2 und $z\hat{\gamma}(z)$, wie sie zum Beispiel in (5.19) auftreten, feststellt, trägt die führende Ordnung nur zu einer Massenrenormierung bei. Die renormierte Masse

$$M_r = M + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{I(\omega)}{\omega^3}, \quad (5.31)$$

die nur für $s > 2$ endlich ist, ist gerade die Summe der Masse des freien Teilchens und der Massen der Badoszillatoren. Das Resultat für $s=2$ ist übrigens exakt, wenn man die spektrale Dichte bei $z=\omega_c$ scharf abschneidet. Für höhere geradzahlige s findet man ebenfalls logarithmische Terme, die jedoch für unsere Betrachtungen nicht von Bedeutung sind.

Mit der Entwicklung von $\hat{\gamma}(z)$ für kleines z sind wir jetzt in der Lage, das Langzeitverhalten von $A(t)$ und $Q(t)$ sowie $Q_0(t)$, dem $Q(t)$ für $T=0$, zu bestimmen. Für die technischen Details sei auf die Arbeiten von Schramm und Grabert [25,74] verwiesen. Das Resultat für die antisymmetrische Korrelation lautet

$$A(t) = \begin{cases} -\frac{\hbar}{2M\gamma_s} \frac{\sin(\pi s/2)}{\Gamma(s)} t^{s-1} [1 + O(t^{-1}, t^{s-2})] & 0 < s < 2 \\ -\frac{\hbar\pi}{4M\gamma_2} \frac{t}{\ln(t)} [1 + O(\ln^{-1}(t))] & s=2 \quad t \rightarrow \infty \\ -\frac{\hbar}{2M_r} t [1 + O(t^{-2}, t^{2-s})] & s > 2. \end{cases} \quad (5.32)$$

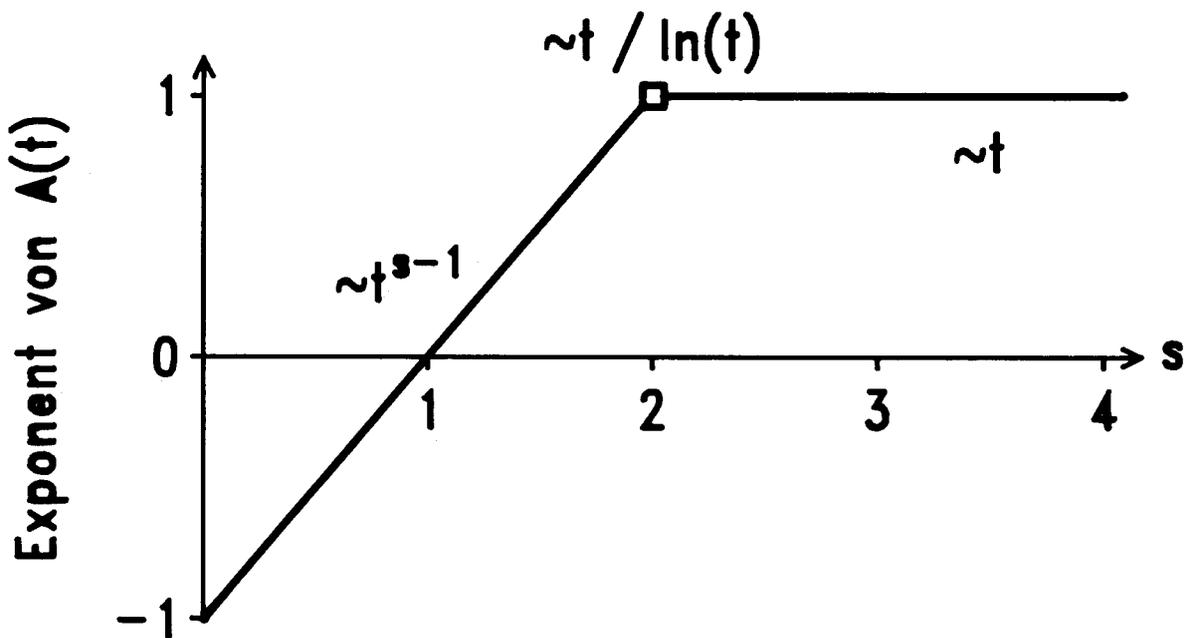


Abb. 11: Exponent des Langzeitverhaltens der antisymmetrischen Orts-Orts-Autokorrelationsfunktion $A(t)$ in Abhängigkeit vom Exponenten s der spektralen Dichtede.

Eine anschauliche Diskussion ist leicht möglich, wenn man sich daran erinnert, daß nach (5.10) $A(t)$ bis auf einen Faktor die Antwortfunktion des Brownschen Teilchens ist. Zunächst verifiziert man, daß für den ohmschen Fall ($s=1$) das Ergebnis (5.21) für lange Zeiten mit (5.32) übereinstimmt. Für sub-ohmsche Dämpfung, also $s < 1$, wird das Brownsche Teilchen durch eine äußere, konstante Kraft wie im ohmschen Fall zunächst beschleunigt. Es erreicht jedoch keine endliche Driftgeschwindigkeit, sondern seine Geschwindigkeit wird für $t \rightarrow \infty$ beliebig klein. Die Ursache liegt in der großen Zahl niederfrequenter Badmoden. Auch im superohmschen Fall ($s > 1$) wird keine endliche Driftgeschwindigkeit er-

reicht, sondern das Teilchen wird immer weiter beschleunigt. Bei $s > 2$ findet man sogar eine kinematische Bewegung. Durch die Abnahme der Zahl der niederfrequenten Oszillatoren wird also die Abbremsung immer uneffektiver, bis sich schließlich für $s > 2$ der Effekt des Bades nur noch darin äußert, daß seine Masse mitbeschleunigt werden muß, das heißt die Beschleunigung durch eine zeitlich konstante Kraft F ist in diesem Bereich F/M_r .

Unter Beachtung von (5.16) erhalten wir aus (5.13) und (5.14) für die Laplace-Transformierte der Verschiebungs-Korrelationsfunktion

$$\hat{Q}(z) = \frac{2}{\hbar\beta} \frac{\hat{A}(z)}{z} + \frac{4}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{z} \frac{z^2 \hat{A}(z) - \nu_n^2 \hat{A}(\nu_n)}{z^2 - \nu_n^2}. \quad (5.33)$$

Diese Beziehung ist eine Konsequenz des Fluktuations-Dissipations-Theorems, wobei die Proportionalität zwischen der antisymmetrischen Ortskorrelation $A(t)$ und der Antwortfunktion $\chi(t)$ zu berücksichtigen ist. Bei endlichen Temperaturen kommt der führende Beitrag vom ersten Term in (5.33), während bei Temperatur Null das aus der unendlichen Summe entstehende Integral auszuwerten ist, das dann den alleinigen Beitrag liefert, da der erste Term proportional mit T verschwindet.

Wenden wir uns zunächst dem Fall endlicher Temperaturen zu. Für lange Zeiten ergibt sich asymptotisch

$$Q(t) \sim \frac{2}{\hbar\beta} \int_0^t ds A(s), \quad t \rightarrow \infty, T > 0 \quad (5.34)$$

so daß das Zeitverhalten der Verschiebungs-Korrelationsfunktion und das der antisymmetrischen Ortsautokorrelationsfunktion sehr eng miteinander verknüpft sind. Aus (5.32) und (5.34) erhält man

$$Q(t) = \begin{cases} -\frac{\sin(\pi s/2)}{M\beta\gamma_s \Gamma(s+1)} t^s [1 + O(t^{-1}, t^{s-2})] & 0 < s < 2 \\ -\frac{\pi}{4M\beta\gamma_2} \frac{t^2}{\ln(t)} [1 + O(\ln^{-1}(t))] & s = 2 \\ -\frac{1}{2M_r\beta} t^2 [1 + O(t^{-2}, t^{2-s})] & s > 2. \end{cases} \quad t \rightarrow \infty, T > 0 \quad (5.35)$$

Für $s=1$ reproduzieren wir wieder das ohmsche Resultat bei dem die Verschiebungskorrelation und damit das mittlere Verschiebungsquadrat (5.15) diffusiv proportional mit der Zeit anwächst. Abhängig von der Dichte niederfrequenter Badmoden finden wir auch hier für $s<1$ wieder ein langsames Anwachsen, also sub-diffusives Verhalten, und ein schnelleres Anwachsen, also super-diffusives Verhalten, für $s>1$. Für $s=2$ ergibt sich, wie schon bei $A(t)$, ein nichtalgebraisches Zeitgesetz und für $s>2$ bewegt sich das Teilchen gleichförmig als hätte es eine endliche Anfangsgeschwindigkeit gehabt, die erhalten bleibt und durch die thermische Geschwindigkeit

$$v_{\beta} = \left(\frac{k_B T}{M_r} \right)^{1/2} \quad (5.36)$$

eines Teilchens mit renormierter Masse M_r bestimmt ist. Die Vorfaktoren in (5.35) kann man als verallgemeinerte Diffusionskoeffizienten D_s bezeichnen, wobei man für $s=1$ wieder den üblichen Diffusionskoeffizienten $D_1=D$ in (5.26) erhält.

Für Temperatur Null ist die Berechnung des Langzeitverhaltens von $Q_0(t)$ aufwendiger, da je nachdem welchen Wert der Exponent s annimmt, verschiedene Methoden angewendet werden müssen. Man erhält schließlich [25,74]

$$Q_0(t) = \begin{cases} -\frac{\hbar}{M(2-s)\sin(\pi/(2-s))} \left(\frac{\sin(\pi s/2)}{\gamma_s} \right)^{1/(2-s)} [1 + O(\omega_c^{-1})] & 0 < s < 1 \\ -\frac{\hbar}{\pi M \gamma_1} \ln(t) [1 + O(\ln^{-1}(t))] & s=1 \\ -\frac{\hbar}{2M \gamma_s \Gamma(s)} \frac{\sin^2(\pi(2-s)/2)}{\cos(\pi(2-s)/2)} t^{s-1} [1 + O(t^{s-2})] & 1 < s < 2 \\ -\frac{\pi^2 \hbar}{8M \gamma_2} \frac{t}{\ln^2(t)} [1 + O(\ln^{-1}(t))] & s=2 \\ -\frac{\hbar M \gamma_s}{2M_r^2 \Gamma(4-s) \cos(\pi(s-2)/2)} t^{3-s} [1 + O(t^{2-s})] & 2 < s < 3 \\ -\frac{\hbar M \gamma_3}{\pi M_r^2} \ln(t) [1 + O(\ln^{-1}(t))] & s=3 \\ - \text{const.} & s > 3. \end{cases} \quad (5.37)$$

$t \rightarrow \infty, T=0$

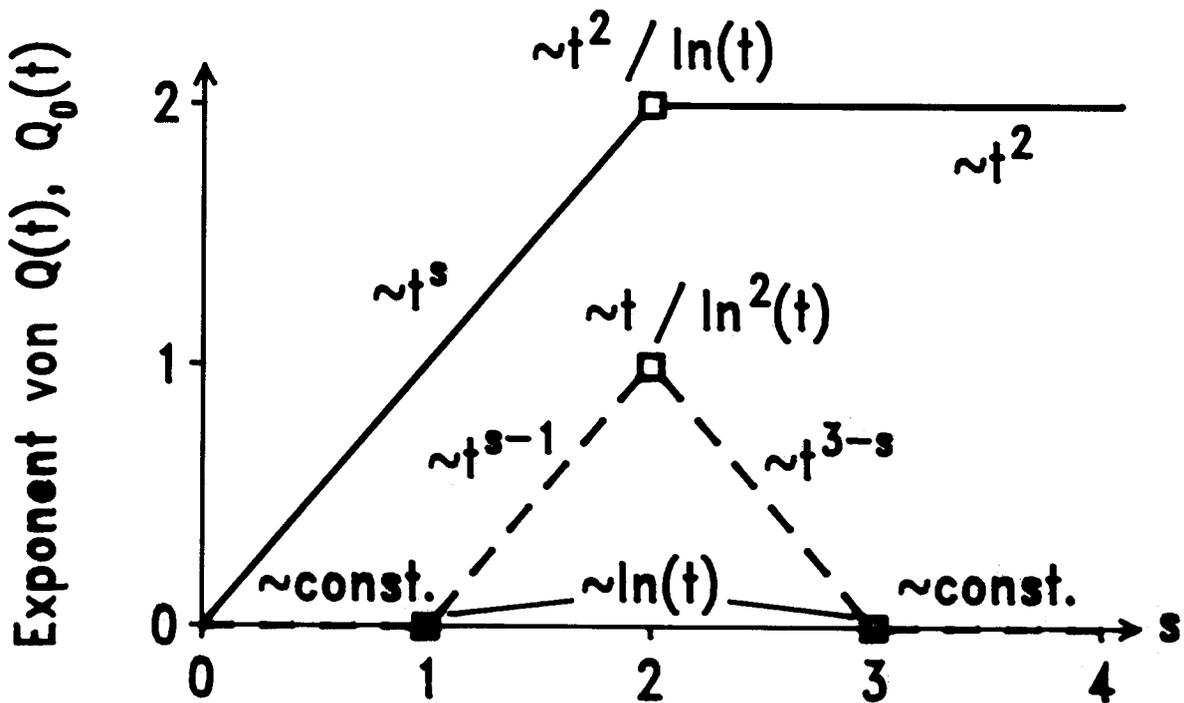


Abb. 12: Exponent des Langzeitverhaltens der symmetrischen Orts-Orts-Korrelationsfunktion bei endlichen Temperaturen $Q(t)$ (durchgezogen) und bei Temperatur Null $Q_0(t)$ (gestrichelt) in Abhängigkeit vom Exponenten s der spektralen Dichte.

Beim Betrachten dieses Resultats fallen zwei Effekte auf. Da es bei Temperatur Null keinen Energietransport vom Bad zum Brownschen Teilchen mehr gibt, ist die Zeitentwicklung von $Q_0(t)$ langsamer als die von $Q(t)$ bei endlichen Temperaturen. Wir hatten dies schon im ohmschen Fall festgestellt, wo bei Temperatur Null $Q_0(t)$ in Übereinstimmung mit (5.37) nur logarithmisch anwuchs. Für $s < 1$ findet man als Folge davon sogar, daß die Verschiebungskorrelation für lange Zeiten endlich bleibt. Bemerkenswert ist weiter, daß für $s > 2$ nicht der kinematische Fall erreicht wird, sondern sich im Gegensatz zum Fall endlicher Temperaturen die Zeitentwicklung in diesem Bereich wieder verlangsamt. So erreicht man bei $s = 3$, das bei einem dreidimensionalen Phononenbad realisiert sein kann, wieder das ohmsche Resultat mit seiner logarithmischen Zeitabhängigkeit. Für $s > 3$ geht $Q_0(t)$ für lange Zeiten gegen einen konstanten Wert, der vom Hochfrequenzabschneiden abhängt und deshalb in (5.37) nicht explizit angegeben ist. Dies ist der einzige Fall, abgesehen von der Massenrenormierung, bei dem das Abschneiden ein Ergebnis beeinflusst. Die schnellere

Zeitentwicklung für zunehmendes s bei $s < 2$ hatten wir mit der effektiv schwächer werdenden Dämpfung durch Abnahme der niederfrequenten Oszillatordichte erklärt. Für $s > 2$ bei endlichen Temperaturen hatte dies zu einem kinematischen Verhalten geführt. Auch bei $T=0$ macht diese Erklärung das Verhalten bei $s > 2$ plausibel. Die thermische Geschwindigkeit (5.36) geht mit abnehmender Temperatur gegen Null. Für lange Zeiten und bei abnehmender Zahl von niederfrequenten Oszillatoren muß das Teilchen also den Impuls-Null-Grundzustand erreichen, wie wir auch bei der Diskussion von $\langle p^2 \rangle_\beta$ in (5.18) gesehen haben. Die mittlere Geschwindigkeit des Brownschen Teilchens geht somit in diesem Bereich gegen Null was das Resultat (5.37) für große s erklärt.

Wir haben hiermit das Langzeitverhalten der Gleichgewichts-Korrelationsfunktionen $Q(t)$, $Q_0(t)$ und $A(t)$ vollständig diskutiert. Die von uns mit Hilfe von Funktionalintegralen abgeleiteten Resultate lassen sich durch etwas konventionellere Methoden, zum Beispiel über Heisenbergsche Bewegungsgleichungen [29], bestätigen.

Da die Dynamik von Nichtgleichgewichtszuständen des freien Brownschen Teilchens allein durch seine Gleichgewichtseigenschaften bestimmt ist, sind wir jetzt in der Lage auch hierüber Aussagen zu machen. Dazu bestimmen wir im folgenden Abschnitt zunächst die propagierende Funktion.

5.5. Die propagierende Funktion

Die propagierende Funktion des freien Brownschen Teilchens erhalten wir aus der propagierenden Funktion des harmonischen Oszillators (5.2) durch den Grenzübergang $\omega_0 \rightarrow 0$. Dabei divergiert die Größe Λ , die wir beim harmonischen Oszillator als Ortsautokorrelationsfunktion interpretiert hatten, wegen des fehlenden Potentials. Dies hat zur Konsequenz, daß statt der Korrelation $S(t)$ die Verschiebungskorrelation $Q(t)$ einzuführen ist und beispielsweise der \bar{r}^2 -Term in der propagierenden Funktion wegfällt. Aber nicht nur im Exponenten wirkt sich diese Divergenz aus. Da sich das Teilchen bei verschwindendem Potential beliebig ausbreiten kann, muß die Normierung auf eine Längeneinheit L bezogen werden. Die zugehörige Gleichgewichtsdichtematrix

$$\rho_\beta(x, r) = \frac{1}{L} \exp \left[-\frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} x^2 \right] \quad (5.38)$$

hängt nur noch von der Koordinatendifferenz $x=q-q'$ ab und ist somit erwartungsgemäß translationsinvariant. Häufig hat man als Anfangszustand einen lokalisierten Zustand, wie es später beim Wellenpaket der Fall sein wird. Es ist dann sinnvoll, die Normierungsfaktoren in die Präparationsfunktion hineinzudefinieren, die wir wieder $\lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r})$ nennen. Der Anfangszustand ist dann durch

$$\rho(x_i, r_i, t=0) = \int d\bar{x}d\bar{r} \lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) \exp\left[-\frac{\langle p^2 \rangle}{2\hbar^2} x_i^2\right] \quad (5.39)$$

gegeben und auf dem unendlichen Intervall von $-\infty$ bis $+\infty$ auf Eins normiert. In der propagierenden Funktion

$$J(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = \frac{1}{4\pi|A(t)|} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r})\right] \quad (5.40)$$

tritt der in der Präparationsfunktion absorbierte Λ -Faktor nicht mehr auf. Die zugehörige effektive Wirkung ergibt sich nach dem Grenzübergang in (5.3) zu

$$\begin{aligned} \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = & i \frac{\langle p^2 \rangle}{2\hbar} \bar{x}^2 + (x_i r_i + x_f r_f) M \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} \\ & + x_i r_f \frac{\hbar}{2A(t)} - x_f r_i \frac{2M^2}{\hbar} \left[\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}^2(t)}{A(t)} \right] \\ & + x_i \bar{r} \left[-M \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \frac{\hbar}{2A(t)} \right] + i x_i \bar{x} \left[-\frac{\langle p^2 \rangle}{\hbar} + \frac{M \dot{Q}(t)}{2 A(t)} \right] \\ & + x_f \bar{r} \left[\frac{2M^2}{\hbar^2} \left[\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}^2(t)}{A(t)} \right] - M \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} \right] + i x_f \bar{x} \frac{M^2}{\hbar} \left[\dot{Q} \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \dot{Q}(t) \right] \\ & + i x_i^2 \left[\frac{\langle p^2 \rangle}{2\hbar} - \frac{M \dot{Q}(t)}{2 A(t)} - \frac{\hbar}{4 A^2(t)} Q(t) \right] \\ & + i x_i x_f \left[-\frac{M^2}{\hbar} \left(\dot{Q}(t) \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \dot{Q}(t) \right) + \frac{M}{2A^2(t)} \left(A(t) \dot{Q}(t) - 2\dot{A}(t) Q(t) \right) \right] \\ & + i x_f^2 \left[\frac{\langle p^2 \rangle}{2\hbar} + \frac{M^2}{\hbar} \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} \left(\dot{Q}(t) - \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} Q(t) \right) \right] \end{aligned} \quad (5.41)$$

Dabei haben wir mit (5.7) das Ω in (5.3) durch $\langle p^2 \rangle_\beta$ ersetzt, da diese Interpretation auch für das freie Teilchen richtig ist. Entwickelt man in der Wirkung die Korrelationsfunktionen $Q(t)$ und $A(t)$ für kurze Zeiten in führender Ordnung, so findet man, daß

$$J(x_f, r_f, 0, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = \exp \left[-\frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} \bar{x}^2 \right] \delta(x_f - x_i) \delta(r_f - r_i) \quad (5.42)$$

ist, wie es auch sein muß, damit sich für $t \rightarrow 0$ der richtige Anfangszustand (5.39) ergibt.

Interessant ist es, zu untersuchen, welchen Endzustand ein beliebiger Anfangszustand asymptotisch für große Zeiten erreicht. Es gibt mehrere Gründe zu vermuten, daß sich hier verschiedene Verhaltensweisen in Abhängigkeit von der Temperatur und dem Exponenten s der spektralen Baddichte ergeben können. Ein Potential, das wie im harmonischen Fall dazu führt, daß für $t \rightarrow \infty$ immer das Gleichgewicht erreicht wird, fehlt hier. Da die Art des asymptotischen Zustands vom Langzeitlimes der propagierenden Funktion abhängt, werden die Resultate (5.32), (5.35) und (5.37) wesentlichen Einfluß haben. Sicher spielt die Temperatur eine Rolle wie wir vom unterschiedlichen Verhalten von $Q(t)$ und $Q_0(t)$ her wissen. Aber auch der Exponent s der spektralen Baddichte wird von Bedeutung sein, da er das Zeitverhalten der Korrelationen bestimmt. Für $s > 2$ ist die renormierte Masse (5.31) endlich, was einen Impulserhaltungssatz für das Gesamtsystem zur Folge hat. Hierin liegt ein wesentlicher Unterschied zu $s \leq 2$, wo die renormierte Masse wegen der niederfrequenten Baddichte gemäß (5.31) divergiert. Die Existenz eines solchen Erhaltungssatzes wird sich sicher auch auf den möglichen asymptotischen Zustand auswirken.

Um den Langzeitlimes der propagierenden Funktion zu bestimmen, setzen wir die asymptotischen Zeitgesetze für die Korrelationen in die Wirkung ein. Dabei können wir alle zeitlich abfallenden Terme vernachlässigen, mit Ausnahme von Termen der Ordnung $r_f/s^{1/2}(t)$. Letztere sind wichtig, da sie das Zerfließen des Zustands beschreiben. In der Dichtematrix können, auch wenn der Anfangszustand lokalisiert war, für lange Zeiten wesentliche Beiträge von großen r_f kommen. Die Größenordnung dieser r_f ist gerade durch die Wurzel aus dem mittleren Verschiebungsquadrat $s(t)$ gegeben.

Wenden wir uns wieder zunächst dem Fall endlicher Temperaturen zu.

Für $s < 2$ findet man für das Langzeitverhalten eines anfänglich bei Null lokalisierten Zustands [25,74]

$$\rho(x_f, r_f, t) = \left(\frac{1}{4\pi D_s t^s} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{4D_s t^s} r_f^2 - \frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} x_f^2 \right] \quad t \rightarrow \infty, T > 0, s < 2. \quad (5.43)$$

Dabei haben wir den verallgemeinerten Diffusionskoeffizienten

$$D_s = \frac{\sin(\pi s/2)}{M\beta\gamma_s \Gamma(s+1)}, \quad (5.44)$$

der sich aus (5.35) ergibt, verwendet. Mit dem entsprechenden Koeffizienten

$$D_2 = \frac{\pi}{4M\beta\gamma_2} \quad (5.45)$$

ergibt sich für $s=2$

$$\rho(x_f, r_f, t) = \left(\frac{\ln(t)}{4\pi D_2 t^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{\ln(t)}{4D_2 t^2} r_f^2 - \frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} x_f^2 \right] \quad t \rightarrow \infty, T > 0, s < 2. \quad (5.46)$$

Für $s \leq 2$ finden wir also, daß ein Nichtgleichgewichtszustand in das Gleichgewicht geht, das durch die Impulsverteilung des x_f^2 -Terms charakterisiert ist. Eine lokalisierte Verteilung zerfließt mit dem durch den r_f^2 -Term gegebenen Zeitgesetz was zu einer gleichmäßigen Verteilung bei unendlichen Zeiten und damit zur Gleichgewichtsverteilung führt.

Für $s > 2$ ist der asymptotische Zustand nicht mehr unabhängig vom Anfangszustand, da wegen der endlichen renormierten Masse die Schwerpunktgeschwindigkeit von System und Bad eine Erhaltungsgröße ist. Von der Präparationsfunktion überlebt der Anteil

$$\lambda^\infty(x_i) = \int dr_i d\bar{x} d\bar{r} \lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) \cdot \exp \left[-\frac{1}{2\hbar^2} \left(\langle p^2 \rangle_\beta (\bar{x} - x_i)^2 + 2MM_r v_\beta^2 x_i (\bar{x} - x_i) + M_r^2 v_\beta^2 x_i^2 \right) \right], \quad (5.47)$$

den wir reduzierte Präparationsfunktion nennen. Für die Dichtematrix bei langen Zeiten ergibt sich

$$\rho(x_f, r_f, t) = \frac{M_r}{\hbar t} \tilde{\lambda}^\infty\left(\frac{M_r r_f}{\hbar t}\right) \exp\left(\frac{iM}{\hbar t} r_f x_f - \frac{\phi}{2\hbar^2} x_f^2\right) \quad t \rightarrow \infty, T > 0, s > 2, \quad (5.48)$$

wobei wir die Größe

$$\phi = \langle p^2 \rangle_\beta - M^2 v_\beta^2 \quad (5.49)$$

und die Fourier-Transformierte

$$\tilde{\lambda}^\infty(k_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \lambda^\infty(x_i) \exp(-ik_i x_i) \quad (5.50)$$

eingeführt haben. Aus (5.48) folgt, daß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort q zu finden, nur noch von der Variablen $v=q/t$ abhängt. Dies läßt folgende Interpretation zu. Zunächst sei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit scharf am Ort $q=0$ lokalisiert. Dabei liege die Geschwindigkeitsverteilung

$$\omega(v) = \frac{M_r}{\hbar} \tilde{\lambda}^\infty\left(\frac{M_r v}{\hbar}\right) \quad (5.51)$$

vor. Geschieht das Auseinanderlaufen der Aufenthaltswahrscheinlichkeit kinematisch, dann ergibt sich gerade die zu (5.48) gehörende Ortsverteilung. Die Verteilung $\omega(v)$ hängt nach (5.47) sowohl von den Eigenschaften des Anfangszustands als auch vom Dissipationsmechanismus ab. Die Kopplung an das Wärmebad spielt dabei nur eine gewisse Zeit lang eine Rolle, wobei sich die Verteilung $\omega(v)$ einstellt. Anschließend spürt das Teilchen keine Dämpfung mehr, was damit zusammenhängt, daß das Zeitintegral über den Dämpfungskern von 0 bis ∞ verschwindet und damit eine Lösung der klassischen Bewegungsgleichung (2.19) mit konstanter Geschwindigkeit möglich ist. Es sei noch darauf hingewiesen, daß die Geschwindigkeitsverteilung $\omega(v)$ nicht mit der asymptotischen Impulsverteilung für $t \rightarrow \infty$ übereinstimmt, da diese zusätzlich von Fluktuationen beeinflusst wird, die von der Badankopplung herrühren.

Wenden wir uns jetzt dem Fall verschwindender Temperatur zu. Für $s > 1$

entsprechen die Ergebnisse denen bei endlichen Temperaturen wobei quantitativ Änderungen auf Grund des Unterschieds im Zeitverhalten von $Q(t)$ und $Q_0(t)$ auftreten. Immer noch erhält man für $s > 2$ eine Impulsverteilung die von der Anfangspräparation abhängt, während die Ortsverteilung homogen wird. Für $1 \leq s \leq 2$ wird für $t \rightarrow \infty$ die Gleichgewichtsverteilung des freien Brownschen Teilchens erreicht, was im ohmschen Fall ($s=1$) wegen des logarithmischen Verhaltens der Verschiebungskorrelation sehr lange dauert. Interessant ist der Bereich $0 < s < 1$. In (5.37) hatten wir schon festgestellt, daß die Verschiebungskorrelation gegen den endlichen Wert $-q_\infty$ mit

$$q_\infty = \frac{\hbar}{M(2-s)\sin(\pi/(2-s))} \left(\frac{\sin(\pi s/2)}{\gamma_s} \right)^{1/(2-s)} \quad (5.52)$$

geht. Dies hat Auswirkungen auf das Langzeitverhalten anfänglich lokalisierter Zustände. Zwar wird für lange Zeiten die Gleichgewichtsverteilung im Impuls erreicht, die Ortsverteilung

$$w_\infty(q) = \left(\frac{1}{4\pi q_\infty} \right)^{1/2} \int d\bar{r} \exp \left[-\frac{1}{4q_\infty} (q-\bar{r})^2 \right] \lambda_\ell^\infty(\bar{r}) \quad t \rightarrow \infty, T=0, s < 1 \quad (5.53)$$

bleibt jedoch lokalisiert. Die Breite des Endzustands wird dabei über q_∞ von der Ankopplung an das Wärmebad und durch λ_ℓ^∞ vom Anfangszustand bestimmt.

$$\lambda_\ell^\infty(\bar{r}) = \int dr_1 d\bar{x} \lambda(0, r_1, \bar{x}, \bar{r}) \exp \left[-\frac{\langle p^2 \rangle}{2\hbar^2} \beta \bar{x}^2 \right] \quad (5.54)$$

beschreibt dabei wieder den relevanten Anteil der Präparationsfunktion. Dieses Resultat ist bemerkenswert. Es bedeutet, daß ein freies Brownsches Teilchen, das zu Beginn lokalisiert ist, trotz einer anfänglichen Verbreiterung für alle Zeiten lokalisiert bleibt. Dies ist eine Folge der großen Zahl von niederfrequenten Badoszillatoren bei Exponenten der spektralen Baddichte $s < 1$. Wir haben damit ein einfaches Beispiel eines dissipativen Phasenübergangs bei $T=0$. Unser Ergebnis paßt auch sehr gut mit den Resultaten zusammen, die für ein Teilchen im periodischen Potential erhalten wurden [27]. Für $s=1$ divergiert die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit des freien, gedämpften Teilchens logarithmisch während

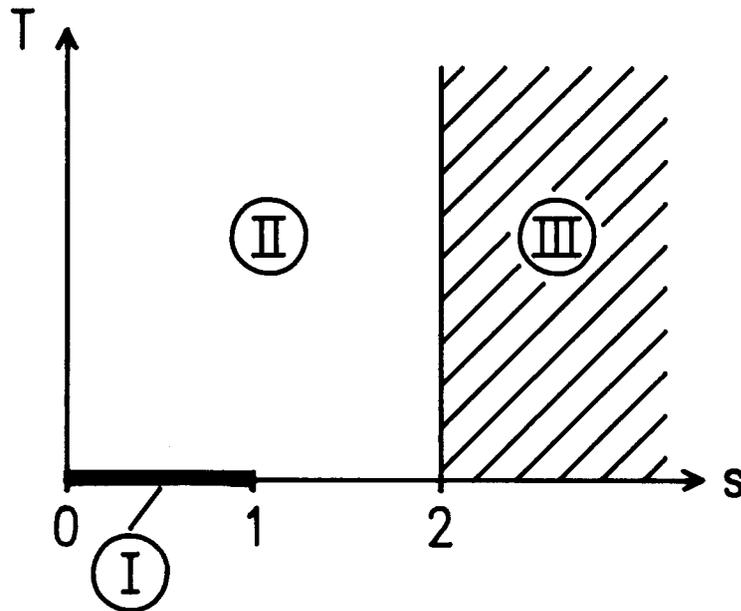


Abb. 13: s - T -Phasendiagramm, das die Bereiche mit verschiedenem asymptotischem Verhalten für $t \rightarrow \infty$ zeigt.

- I : Impulsgleichgewicht, aber räumliche Lokalisierung
- II : unabhängig vom Anfangszustand
- III: homogene räumliche Verteilung, aber Impulsverteilung hängt vom Anfangszustand ab.

bereits ein schwaches, periodisches Potential genügt, um das Teilchen wieder zu lokalisieren. Voraussetzung dafür ist jedoch, daß $\gamma_1 > 1$ ist, also die ohmsche Dämpfungsstärke groß genug ist. Auch der in Kapitel 4 diskutierte dissipative Phasenübergang in RSJ-Kontakt-Netzwerken, der durch die spektrale Dichte $\sim \omega$ verursacht wird, hat somit eine enge Verbindung zum Verhalten des freien Brownschen Teilchens, dessen verschiedene asymptotischen Zustände in Abbildung 13 in einem Phasendiagramm zusammengefaßt sind.

5.6. Dynamik eines anfänglich lokalisierten Zustandes

Nachdem wir im letzten Abschnitt das Verhalten eines allgemeinen Anfangszustandes diskutiert haben, wollen wir jetzt noch ein Beispiel für einen anfänglich lokalisierten Zustand betrachten. Als Anfangszustand wählen wir ein gaußförmiges Wellenpaket. Unser Augenmerk wollen wir vor allem auf die zeitliche Entwicklung der Breite σ des Wellenpakets richten.

Um den Anfangszustand zu präparieren, wenden wir einen Projektionsoperator an, der eine Gaußverteilung der Breite σ_0 im Ort erzeugt. Dieser ist gegeben durch

$$P_{\sigma_0} = \int dq \left[\left(\frac{1}{2\pi\sigma_0} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{q^2}{2\sigma_0} \right) \right]^{1/2} |q\rangle \langle q|. \quad (5.55)$$

Nach (2.42) folgt daraus die Präparationsfunktion

$$\lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_0} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{r_i^2}{2\sigma_0} - \frac{x_i^2}{8\sigma_0} \right] \delta(x_i - \bar{x}) \delta(r_i - \bar{r}), \quad (5.56)$$

die so gewählt ist, daß die reduzierte Anfangsdichtematrix

$$\rho(x_i, r_i, t=0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_0} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{r_i^2}{2\sigma_0} - \left(\frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} + \frac{1}{8\sigma_0} \right) x_i^2 \right], \quad (5.57)$$

die aus (5.39) folgt, wie dort beschrieben normiert ist. Zu beachten ist, daß die Ortsmessung nicht nur den diagonalen Anteil der Präparationsfunktion beeinflusst, sondern auch den nichtdiagonalen Anteil. Dies hat, wie in (5.57) zu sehen ist, eine Veränderung der Impulsverteilung zur Folge, wobei erwartungsgemäß die Impulsvarianz mit wachsender Lokalisierung zunimmt.

Mit der propagierenden Funktion (5.40) erhält man für die Zeitentwicklung des Anfangszustandes (5.57) [73]

$$\begin{aligned} \rho(x_f, r_f, t) = & \left(\frac{1}{2\pi\sigma(t)} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\langle p^2 \rangle_\beta}{2\hbar^2} x_f^2 \right) \\ & \cdot \exp \left[-\frac{1}{2\sigma(t)} \left(r_f^2 + 2i \frac{M}{\hbar} x_f r_f \left(\dot{Q}(t) - \frac{A(t)\dot{A}(t)}{\sigma_0} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{M^2}{\hbar^2} x_f^2 \left[\dot{Q}^2(t) - \dot{A}^2(t) \left(1 + \frac{2Q(t)}{\sigma_0} \right) - 2 \frac{A(t)\dot{A}(t)\dot{Q}(t)}{\sigma_0} \right] \right) \right], \end{aligned} \quad (5.58)$$

wobei die Breite des Wellenpakets durch

$$\sigma(t) = \sigma_0 \left[1 - \frac{2Q(t)}{\sigma_0} + \frac{A^2(t)}{\sigma_0^2} \right] \quad (5.59)$$

gegeben ist. Die Breite $\sigma(t)$ ist also vollständig durch die Anfangsbreite und die Gleichgewichtskorrelationen bestimmt, so daß wir mit Hilfe der Ergebnisse (5.32), (5.35) und (5.37) leicht das Langzeitverhalten berechnen können. Berücksichtigt man, daß die Verschiebungskorrelation $Q(t)$ immer negativ ist, so folgt aus (5.59), daß die Breite sich nur vergrößern kann, und somit der Zustand tatsächlich immer zerfließt.

Wir untersuchen als erstes wieder den Fall endlicher Temperaturen. Für $s \leq 2$ findet man, daß das Zerfließen des Wellenpakets für lange Zeiten nur von der Verschiebungskorrelation gemäß

$$\sigma(t) = -2Q(t) \quad s \leq 2, t \rightarrow \infty, T > 0 \quad (5.60)$$

abhängt, und somit die Zeitabhängigkeit derjenigen der Diffusion entspricht. Für $s > 2$ gehen sowohl $A(t)$ als auch $Q(t)$ proportional zu t^2 , so daß sich für die Breite das kinematische Verhalten

$$\sigma(t) = v_{\infty}^2 t^2 \quad s > 2, t \rightarrow \infty, T > 0 \quad (5.61)$$

ergibt. Die Geschwindigkeit

$$v_{\infty} = \left(v_{\beta}^2 + \frac{\hbar^2}{4M_r^2 \sigma_0} \right)^{1/2} \quad (5.62)$$

wird bestimmt durch die von der Verschiebungskorrelation herrührende thermische Geschwindigkeit (5.36) und einem Beitrag, der vom antisymmetrischen Anteil der Korrelation herrührt und von der Anfangsbreite abhängt. Im klassischen Limes, also bei hohen Temperaturen, spielt nur der erste Term eine Rolle. Das Zerfließen des Wellenpakets ist dann für lange Zeiten unabhängig von der Anfangsbreite σ_0 . Der zweite Term, der die Quantenkorrekturen beschreibt, wird im Quantenregime, also bei kleinen Temperaturen, dominierend. Es ergibt sich dann genau das Resultat, das man vom quantenmechanischen Zerfließen eines Wellenpakets ohne Dissipation her kennt, wenn man davon absieht, daß die Teilchenmasse wieder durch die renormierte Masse M_r zu ersetzen ist. Dies ist in Übereinstimmung mit den Überlegungen, die wir oben für den Bereich $s > 2$ und endliche Temperaturen angestellt haben.

Für Temperatur Null und $s > 1$ bestimmt die antisymmetrische Korrelation $A(t)$ das Langzeitverhalten der Breite $\sigma_0(t)$. Dabei setzt sich für $s > 2$ das kinematische Zerfließen (5.61) auch zu $T=0$ fort. Allerdings verschwindet im Limes $T \rightarrow 0$ die thermische Geschwindigkeit v_β in (5.62). Im Bereich $1 < s < 2$ findet man mit (5.32) wieder das gesamte Spektrum von subdiffusivem bis zu superdiffusivem Verhalten. Der Grenzfall ist der ohmscher Dämpfung, wo das von $Q_0(t)$ herrührende logarithmische Zerfließen auftritt. Für $s < 1$ finden wir in Übereinstimmung mit der Diskussion im vorigen Abschnitt Lokalisierung, das heißt die Breite des Wellenpakets bleibt auch für $t \rightarrow \infty$ endlich. Für die Lokalisierungslänge ξ ergibt sich

$$\xi = (2q_\infty + \sigma_0)^{1/2}. \quad (5.63)$$

Hier gehen die Anfangsbreite sowie auf Grund der Dynamik der asymptotische Wert der Verschiebungskorrelation ein. Für $s \rightarrow 0$ verbreitert sich die Verteilung praktisch nicht mehr, da der Einfluß niederfrequenter Badoszillatoren zu groß ist. Andererseits divergiert nach (5.52) q_∞ und damit auch ξ für $s \rightarrow 1$, so daß hier der Übergang zum logarithmischen Verhalten bei ohmscher Dämpfung stattfindet.

6. Transport über eine parabolische Barriere

Als weitere Anwendung der Realzeitmethode betrachten wir die Dynamik eines Brownschen Teilchens an einer parabolischen Barriere. Dies wird es uns ermöglichen, die Zerfallsrate eines metastabilen Zustands bei nicht zu niedrigen Temperaturen zu bestimmen und die Resultate der Imaginärzeitrechnung zu überprüfen.

Zunächst diskutieren wir die klassische Theorie, da wir von ihr einige Ideen für die quantenmechanische Theorie verwenden können. Ausgehend von den Ergebnissen für den gedämpften harmonischen Oszillator aus dem vorigen Kapitel werden wir dann den Propagator für die parabolische Barriere ableiten. Für lange Zeiten ergibt sich die quantenmechanische Verallgemeinerung der Fluß-Lösung von Kramers. Unter Verwendung der Gleichgewichtsverteilung des harmonischen Oszillators werden wir die Quantenkorrekturen zum thermisch aktivierten Zerfall eines metastabilen Zustands erhalten. Zum Abschluß deuten wir die Fortsetzung der Theorie in den Tieftemperaturbereich an.

6.1. Kramers-Theorie

Um das spätere Verständnis unserer quantenmechanischen Theorie der Durchdringung einer parabolischen Barriere zu erleichtern, wollen wir in diesem Abschnitt die zugehörige, auf Kramers [15] zurückgehende, klassische Theorie beschreiben.

Untersucht man den Zerfall eines metastabilen Zustands in einem Potential wie es in der Abbildung 2 am Anfang des dritten Kapitels dargestellt ist, so muß man in Abhängigkeit von der Dämpfungsstärke zwei Bereiche unterscheiden. Bei schwacher Dämpfung sind die Relaxationsvorgänge so langsam, daß in der Potentialmulde keine Gleichgewichtsverteilung vorliegt. Die Energie ist dann eine langsam relaxierende Größe. Es läßt sich eine Fokker-Planck-Gleichung für die Energieverteilung angeben, man spricht daher auch von Energiediffusion. Wir wollen jedoch im weiteren immer davon ausgehen, daß in der Mulde, also in einem gewissen Gebiet links der Barriere, Gleichgewicht vorliegt. Voraussetzung dafür ist mittlere bis starke Dämpfung $\gamma \geq \omega_p$. Dann wird ein Brownsches Teilchen, das die Barriere überwindet, dies diffusiv tun. Es wird sich also mehrmals hin und her über die Barriere bewegen, bevor es diese endgültig überwunden hat.

Die Kramers-Theorie beschränkt sich auf frequenzunabhängige, das heißt ohmsche Dämpfung. Da dies genügt, um die wesentlichen Ideen zu verstehen, wollen wir hier nur darauf hinweisen, daß auch frequenzabhängige Dämpfung behandelt werden kann [75].

Im Rahmen der Kramers-Theorie versucht man, eine stationäre Lösung zu finden, die einen Fluß über die Barriere beschreibt und mit der Zerfallsrate in Verbindung gebracht werden kann. Dabei wird die Gleichgewichtsverteilung in der Mulde immer wieder aufgefüllt und der Anteil, der die Barriere überquert hat, entfernt, um so Stationarität zu gewährleisten.

Als Ausgangspunkt wählen wir die Klein-Kramers-Gleichung [15,76] für eine bei $q=0$ liegende parabolische Barriere

$$\frac{\partial P(q,v)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial q} v - \frac{\partial}{\partial v} (\omega_b^2 q - \gamma v) + \frac{\gamma k_B T}{M} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} P(q,v). \quad (6.1)$$

Dies ist eine Fokker-Planck-Gleichung, die die zeitliche Entwicklung der orts- und geschwindigkeitsabhängigen Verteilung $P(q,v)$ dort beschreibt, wo die parabolische Näherung gut ist, also in der Nähe des Barrierenmaximums. Die stationäre Lösung ergibt sich daraus durch Nullsetzen der rechten Seite. Ein geeigneter Ansatz ist

$$P(q,v) = \zeta(q,v) \exp \left[-\frac{M}{2k_B T} (v^2 - \omega_b^2 q^2) \right], \quad (6.2)$$

wobei die kanonische Verteilung mit einem orts- und geschwindigkeitsabhängigen Vorfaktor versehen wurde. Dieser Ansatz ist dadurch motiviert, daß eine stationäre Lösung nur möglich ist, wenn sehr weit links und rechts der Barriere die kanonische Lösung vorliegt. Voraussetzung für eine stationäre Lösung, die einen Fluß über die Barriere beschreibt, ist dann, daß die kanonische Verteilung links und rechts eine unterschiedliche Amplitude hat.

Setzt man (6.2) in (6.1) ein, so erhält man

$$\left\{ -v \frac{\partial}{\partial q} - (\omega_b^2 q + \gamma v) \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\gamma k_B T}{M} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right\} \zeta(q,v) = 0. \quad (6.3)$$

Diese Gleichung wird offensichtlich durch $\zeta(q,v)=\text{const.}$ gelöst, womit

wir, wie erwartet, die kanonische Verteilung erhalten haben. Eine weitere stationäre Lösung erhält man mit dem Ansatz

$$\zeta(q, v) \equiv \zeta(u) = \zeta(v - aq), \quad (6.4)$$

in dem ζ nur noch von einer speziellen Kombination aus Ort und Geschwindigkeit abhängt, die wir als Kramers-Variable u bezeichnen. Um einen Fluß nach rechts zu erhalten, fordern wir als Randbedingungen $\zeta(\infty)=1$ und $\zeta(-\infty)=0$. Dabei ergibt sich wegen der Linearität von (6.3) keine Einschränkung der Allgemeinheit.

Lösen der Differentialgleichung (6.3) mit dem Ansatz (6.4) führt auf

$$P(q, v) \sim \exp\left[-\frac{M}{2k_B T}(v^2 - \omega_b^2 q^2)\right] \int_{-\infty}^u dw \exp\left[-\frac{M\left[-\frac{\gamma}{2} + \left(\frac{\gamma^2}{4} + \omega_b^2\right)^{1/2}\right]}{2\gamma k_B T} w^2\right]. \quad (6.5)$$

mit der Kramers-Variablen

$$u = v - \left[\frac{\gamma}{2} + \left(\frac{\gamma^2}{4} + \omega_b^2\right)^{1/2}\right] q. \quad (6.6)$$

Diese Verteilung ist nicht normiert, da dies wegen des rein parabolischen Potentials, das nach unten nicht beschränkt ist, nicht möglich ist. Der Wert des Flusses an der Barriere hängt jedoch vom tatsächlichen Vorfaktor in (6.5) ab. Jetzt müssen wir uns daran erinnern, daß sich auf der linken Seite der Barriere eine Mulde befindet, in der um das Minimum herum die normierbare Gleichgewichtsverteilung des gedämpften harmonischen Oszillators vorliegt. Setzen wir die Verteilung (6.5) nach links fort indem wir im ersten Faktor die harmonische Näherung durch das tatsächliche Potential ersetzen und berücksichtigen, daß der zweite Faktor links der Barriere gegen Eins geht, so können wir die Verteilungen an der Barriere und in der Mulde miteinander verbinden. Dies legt uns den Vorfaktor von (6.5) und den Fluß über die Barriere fest. Für die Zerfallsrate erhält man schließlich [15]

$$\Gamma = \frac{\omega_0}{2\pi} \frac{\omega_R}{\omega_b} \exp(-\beta V_b), \quad (6.7)$$

wobei ω_R die renormierte Frequenz für ohmsche Dämpfung gemäß (3.16) und (3.18) ist. Wir haben so das klassische Resultat erhalten, das wir bereits in (3.24) verwendet haben.

6.2. Vom harmonischen Oszillator zur parabolischen Barriere

Wie schon im Fall des freien Brownschen Teilchens gehen wir wieder von den Resultaten für die quantenmechanische propagierende Funktion (5.2) des gedämpften harmonischen Oszillators aus. Um den Übergang zur parabolischen Barriere zu vollziehen, ersetzen wir die Frequenz ω_0 des harmonischen Oszillators durch $i\omega_b$, wobei ω_b die Frequenz der parabolischen Barriere ist. Die Dynamik an der Barriere ist durch die entsprechend analytisch fortgesetzten Größen Λ , Ω , $S(t)$ und $A(t)$ bestimmt. Wir werden im folgenden versuchen, diese Größen zu verstehen. Bereits beim freien Teilchen hatten wir festgestellt, daß die Interpretation als Gleichgewichtskorrelation nicht mehr ohne weiteres möglich ist. Die Situation ist jetzt noch verschärft, da das Potential nicht einmal mehr nach unten beschränkt ist.

Wenden wir uns zunächst der Größe Λ zu, die jetzt durch

$$\Lambda = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\nu_n^2 + \zeta_n - \omega_b^2} \quad (6.8)$$

gegeben ist. Für den harmonischen Oszillator konnten wir eine Verbindung zur Ortsautokorrelation herstellen. Dies ist jetzt nicht mehr möglich. Im klassischen Grenzfall, also für große Temperaturen, ist Λ negativ, was im Widerspruch zur Interpretation als Ortsautokorrelationsfunktion steht, da diese immer positiv sein muß. Betrachtet man die kanonische Gleichgewichtsverteilung $P_\beta(q,v)$, also (6.2) für $\zeta(q,v)=1$, so kommt diese Schwierigkeit nicht unerwartet. Wegen des Potentialverlaufs divergiert P_β für große Entfernungen vom Potentialmaximum. Daraus folgt, daß eine der Ortsautokorrelationsfunktion entsprechende Größe negativ sein muß, wie wir es gerade festgestellt haben. Aus dieser Betrachtung des Hochtemperatur-Grenzfalles schließen wir, daß für die parabolische Barriere eine neue Interpretation der Größen in der propagierenden Funktion notwendig ist, andererseits aber die Ersetzung $\omega_0 \rightarrow i\omega_b$ zu vernünftigen Resultaten führt.

Erniedrigt man ausgehend vom klassischen Grenzfall die Temperatur, so wird auch Λ betragsmäßig kleiner. Bei einer bestimmten Temperatur verschwindet Λ , da sich dann der negative $n=0$ -Term und der restliche, positive Anteil der Summe gerade kompensieren. Die Untersuchung von Λ wird durch den Dämpfungsanteil ζ_n erschwert. Um das Verhalten besser zu verstehen, betrachten wir zunächst den ungedämpften Fall. Dann läßt sich die unendliche Summe ausführen und wir erhalten

$$\Lambda = -\frac{1}{2\omega_b} \cot\left(\frac{\hbar\beta\omega_b}{2}\right). \quad (6.9)$$

Hier wird nochmals deutlich, wie Λ ausgehend vom klassischen Bereich betragsmäßig abnimmt, um bei $\hbar\beta=\pi/\omega_b$ zu verschwinden. Bei noch tieferen Temperaturen wird Λ positiv und erreicht schließlich einen Pol von wo aus sich das ganze wiederholt. Wenn man bedenkt, daß man durch Wick-Rotation zum harmonischen Oszillator in Realzeit übergehen kann, so ist es nicht überraschend, daß dort das gleiche Problem auftritt [2,30,31]. Beim harmonischen Oszillator ist es als Kaustiken-Phänomen schon lange bekannt.

Das Auftreten von Kaustiken ist eng verknüpft mit der Existenz von konjugierten Punkten. Dabei treffen sich für bestimmte Zeiten in Realzeit oder Temperaturen in Imaginärzeit alle klassischen Trajektorien, die von einem Punkt mit beliebiger Geschwindigkeit ausgehen, unabhängig von ihrer Anfangsgeschwindigkeit im konjugierten Punkt. Beim harmonischen Oszillator existieren offensichtlich solche Punkte, da bei der halben Periodendauer der am Ursprung gespiegelte Ausgangspunkt und nach einer vollen Periode T der Ausgangspunkt selbst erreicht wird. Dies bedeutet für den Propagator, daß er sich zu solchen Zeiten zu einer Deltafunktion zusammenzieht. Den analogen Effekt beobachten wir in Imaginärzeit, wo das Verschwinden von Λ zu einer verschwindenden Breite der kanonischen Verteilung führt.

Aus (6.9) können wir auch für den dissipativen Fall schließen, daß das Verschwinden von Λ der Existenz von konjugierten Punkten bei $(2n+1)T/2$, $n=0,1,\dots$ für den harmonischen Oszillator entspricht. Gemäß obiger Diskussion sollten aber weitere konjugierte Punkte auftreten, die denen bei nT , $n=1,2,\dots$ des harmonischen Oszillators entsprechen. Dies ist in der Tat der Fall, erfordert aber einer Untersuchung von Ω . Durch

analytische Fortsetzung erhält man aus (5.6) für die parabolische Barriere

$$\Omega = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\zeta_n - \omega_b^2}{\nu_n^2 + \zeta_n - \omega_b^2} \quad (6.10)$$

Verwendet man die Beziehung (5.7), die eine Verbindung zur Impulsautokorrelation herstellt, so erhält man im klassischen Grenzfall den gewohnten Wert $Mk_B T$, der unabhängig vom Potential ist. Bei Erniedrigung der Temperatur zeigt Ω ebenfalls einen Nulldurchgang und anschließend eine Polstelle. In diesem Fall interessieren wir uns mehr für den Pol, da in Imaginärzeit auch eine sehr breite Impulsverteilung zum Auftreten konjugierter Punkte führen kann.

Um den Zusammenhang zwischen Nullstellen von Λ und Polstellen von Ω einerseits und konjugierten Punkten andererseits auch für beliebige frequenzabhängige Dämpfung zu verstehen, betrachten wir die Lösungen der klassischen Imaginärzeit-Bewegungsgleichung (2.67) für die parabolische Barriere. Die Trajektorie starte bei $\bar{q}(0)$ mit der Geschwindigkeit $\dot{\bar{q}}(0)$ und ende bei $\bar{q}(\hbar\beta)$. Die Lösung der Bewegungsgleichung läßt sich leicht durch Fouriertransformation finden [25,26]. Uns interessiert die Abhängigkeit des Endpunktes von den Anfangsbedingungen, die sich zu

$$\bar{q}(\hbar\beta) = \frac{1}{\Omega - \frac{1}{4\Lambda}} \dot{\bar{q}}(0) + \frac{\Omega + \frac{1}{4\Lambda}}{\Omega - \frac{1}{4\Lambda}} \bar{q}(0) \quad (6.11)$$

ergibt. Ein konjugierter Punkt liegt vor, wenn die Abhängigkeit von der Anfangsgeschwindigkeit herausfällt. Das Ergebnis (6.11) bestätigt unsere obigen Überlegungen, die eine Nullstelle von Λ oder einen Pol von Ω fordern. Des weiteren bestätigt sich, daß die zu $\Lambda=0$ gehörigen konjugierten Punkte die gespiegelten Ausgangspunkte sind, während für $\Omega=\infty$ die konjugierten Punkte die Ausgangspunkte selbst sind. Die erste Divergenz von Ω tritt nach (6.10) gerade bei einer Temperatur auf, die wir unter Verwendung von (3.16) und (3.17) als die crossover-Temperatur identifizieren. Bei dieser Temperatur hat auch Λ einen Pol. Seine Nullstelle liegt demzufolge oberhalb der crossover-Temperatur und verursacht damit

das Auftreten des ersten konjugierten Punktes.

Im Rahmen der Imaginärzeitrechnung zum Zerfall metastabiler Zustände im dritten Kapitel hatten wir festgestellt, daß es unterhalb der crossover-Temperatur notwendig ist, die Anharmonizität des Potentials zu berücksichtigen. Dasselbe werden wir auch für die Realzeitrechnung erwarten. Tatsächlich ist das Auftreten des Kaustiken-Problems abhängig von der harmonischen Näherung. Nur in diesem Fall ist die Periodendauer einer Schwingung unabhängig von deren Amplitude. Da wir uns, wie in Kapitel 3, auf den Temperaturbereich beschränken wollen, in dem die harmonische Näherung gut ist, setzen wir im folgenden voraus, daß die Temperatur höher ist als diejenige, bei der zum ersten Mal ein konjugierter Punkt auftritt. Diese Temperatur, die durch das Verschwinden von Λ bestimmt wird, liegt im Gegensatz zur Imaginärzeitrechnung oberhalb der crossover-Temperatur. Sie beträgt im ungedämpften Fall gerade das Doppelte. Der Unterschied liegt darin, daß in der Realzeitrechnung die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit die wesentliche Rolle spielt. Diese wird durch klassische Wege bestimmt, die wieder an den Ausgangspunkt zurückkehren, wobei auch eine entgegengesetzte Geschwindigkeit erlaubt ist. Bei der Auswertung der Zustandssumme in Imaginärzeit waren jedoch nur rein periodische Wege zugelassen, die eine entsprechend längere Zeit benötigen und somit den Bereich, der gut durch die harmonische Näherung beschrieben wird, ausdehnen. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels werden wir einige Überlegungen anstellen, die andeuten, wie sich der Übergang zum anharmonischen Bereich vollzieht.

Für die propagierende Funktion spielen neben Λ und Ω auch die Funktionen $S(t)$ und $A(t)$ eine wichtige Rolle. Wir werden im folgenden insbesondere deren Langzeitverhalten diskutieren, denn wir sind nicht daran interessiert, wie sich ein beliebiger Anfangszustand für kurze Zeiten entwickelt. Dies ist sicher durch die genauen Details der Präparation bestimmt. Wir wollen vielmehr, in Anlehnung an die Kramers-Theorie, eine stationäre Flußlösung suchen, die sich aus der dynamischen Entwicklung des Anfangszustands ergibt. Dabei werden, wie beim freien Brownschen Teilchen in Abschnitt 5.5., nur bestimmte Eigenschaften der Anfangspräparation überleben, die dann die Zerfallsrate bestimmen.

Nach (5.8) ist die Laplace-Transformierte von $A(t)$ für die parabolische Barriere gegeben durch

$$\hat{A}(z) = -\frac{\hbar}{2M} \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z) - \omega_b^2}. \quad (6.12)$$

Das Langzeitverhalten wird dominiert durch die Nullstelle des Nenners mit dem größten Realteil. Durch Vergleich von (6.12) mit (3.17) stellt man fest, daß diese Nullstelle gerade durch die Frequenz ω_R , die proportional zur crossover-Temperatur ist, gegeben ist. Da (3.17) genau eine positive Lösung hat, erhält man für $A(t)$ für lange Zeiten ein exponentielles Wachstum gemäß

$$A(t) \sim -\frac{\hbar}{2M} \frac{1}{2\omega_R + \hat{\gamma}(\omega_R) + \omega_R \hat{\gamma}'(\omega_R)} \exp(\omega_R t), \quad \text{für } t \rightarrow \infty. \quad (6.13)$$

Die Funktion $S(t)$ ist, wie schon in (5.9) beim harmonischen Oszillator, durch $A(t)$ bestimmt. Auch hier ist das Langzeitverhalten durch das exponentielle Anwachsen

$$S(t) \sim -\frac{\hbar}{2M} \cot\left(\frac{\hbar\beta\omega_R}{2}\right) \frac{1}{2\omega_R + \hat{\gamma}(\omega_R) + \omega_R \hat{\gamma}'(\omega_R)} \exp(\omega_R t), \quad \text{für } t \rightarrow \infty. \quad (6.14)$$

gegeben. Wegen

$$S(0) = \frac{\hbar}{M} \Lambda \quad (6.15)$$

ist auch $S(t)$ von dem oben diskutierten Kaustiken-Problem betroffen, worauf für lange Zeiten der Kotangens-Term in (6.14) hinweist.

Wie schon bei A ist hier keine Interpretation als Gleichgewichtskorrelationsfunktion mehr möglich. Das exponentielle Wachstum von $S(t)$ läßt sich aber dennoch durch die Vorstellung verstehen, daß ein Teilchen beschleunigt die parabolische Barriere hinunterläuft.

6.3. Konstruktion der Flußlösung

Nach der Diskussion im vorigen Abschnitt sind wir jetzt in der Lage, die Entwicklung eines beliebigen Anfangszustands für lange Zeiten mit Hilfe der propagierenden Funktion (5.2) zu berechnen, wobei für Λ , Ω , $S(t)$ und $A(t)$ die entsprechenden Größen der parabolischen Barriere ein-

zusetzen sind.

Bevor wir die Dynamik eines Zustands betrachten, wollen wir uns kurz der Frage der Normierung zuwenden. Wie man in (5.2) sieht, gibt es die Schwierigkeit, daß Λ negativ ist und somit der Vorfaktor imaginär wird, was auf das nach unten nicht beschränkte Potential zurückzuführen ist. Die propagierende Funktion läßt sich somit nicht normieren. Dies braucht uns jedoch nicht weiter zu stören, da der Vorfaktor $(M/2\pi\hbar\Lambda)^{1/2}$ gerade in der kanonischen Dichtematrix ρ_β auftritt. Bei der Behandlung der Kramers-Theorie hatten wir gesehen, daß sich die Zerfallsrate auch mit einer für $|x| \rightarrow \infty$ divergierenden Verteilung berechnen läßt. Das gleiche gilt für die quantenmechanische Verallgemeinerung. Der Faktor $\Lambda^{1/2}$ muß jedoch herausfallen, wenn wir später den effektiven Fluß über die Barriere bestimmen.

Nach (2.49) ergibt sich für die Dichtematrix zur Zeit t

$$\rho(x_f, r_f, t) = \frac{1}{4\pi|A(t)|} \left(\frac{M}{2\pi\hbar\Lambda} \right)^{1/2} \int dx_i dr_i d\bar{x} d\bar{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) \right) \lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}). \quad (6.16)$$

Die Auswertung der Integrale ist in geeigneter Weise durchzuführen, da der diagonale Anteil der kanonischen Dichtematrix für große Argumente divergiert. In Analogie zu (6.2) der Kramers-Theorie schreiben wir die Dichtematrix

$$\rho(x_f, r_f, t) = \rho_\beta(x_f, r_f) G_1(x_f, r_f, t) \quad (6.17)$$

als Produkt aus der kanonischen Dichtematrix und einer Korrekturfunktion $G_1(x_f, r_f, t)$. Damit ist der imaginäre Vorfaktor der propagierenden Funktion in ρ_β absorbiert. Bevor wir G_1 explizit angeben, wollen wir noch eine weitere Zerlegung vornehmen, die ebenfalls durch die Erfahrungen aus der klassischen Theorie motiviert ist. Weit links und rechts der Barriere muß die Dichtematrix ein Vielfaches der kanonischen Dichtematrix sein. Andernfalls kann sich für lange Zeiten keine stationäre Lösung mit endlicher Wahrscheinlichkeitsdichte einstellen. Für unsere jetzige Notation folgt aus (2.43), daß die Präparationsfunktion bis auf

einen Faktor die Form

$$\lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = \delta(x_i - \bar{x}) \delta(r_i - \bar{r}) \quad (6.18)$$

annehmen muß. Wir definieren daher eine zweite Korrekturfunktion G_2 , die die Details der Anfangspräparation und insbesondere deren asymptotisches Verhalten enthält. Die erste Korrekturfunktion wird gemäß

$$G_1(x_f, r_f, t) = \frac{1}{4\pi |A(t)|} \int dx_i dr_i \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Sigma_1(x_f, r_f, t, x_i, r_i) \right] \cdot G_2(x_i, r_i, t, x_f) \quad (6.19)$$

allein über G_2 von der Präparationsfunktion beeinflusst, wobei wir

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \Sigma_1(x_f, r_f, t, x_i, r_i) \right] = \frac{1}{\rho_\beta(x_f, r_f)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, x_i, r_i) \right] \quad (6.20)$$

gesetzt haben. Die neue Wirkung Σ_1 hat die Form

$$\begin{aligned} \Sigma_1(x_f, r_f, t, x_i, r_i) = & i \frac{M}{2\Lambda} (r_i - r_i^0)^2 - \frac{M}{2\Lambda} \frac{S(t)}{A(t)} (x_i - x_i^0) (r_i - r_i^0) \\ & + i \frac{\hbar^2 \Lambda}{8MA^2(t)} \left[1 - \frac{M^2 S^2(t)}{\hbar^2 \Lambda^2} \right] (x_i - x_i^0)^2 \end{aligned} \quad (6.21)$$

mit den Verschiebungen

$$r_i^0 = \frac{M}{\hbar} \left[i \dot{S}(t) x_f + \frac{S(t)}{\Lambda} r_f \right] \quad (6.22)$$

und

$$x_i^0 = \frac{2M}{\hbar} \left[-\dot{A}(t) x_f + i \frac{A(t)}{\Lambda} r_f \right]. \quad (6.23)$$

Diese Wirkung hängt nicht von \bar{x} und \bar{r} ab. Somit beschreibt G_2 die Abweichung des Anfangszustands vom kanonischen Zustand. Dies wird deutlich,

wenn man G_2 näher betrachtet. Verwendet man die Beziehung

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) - \Sigma(x_f, r_f, t, x_i, r_i, x_i, r_i) \right) \right] = \frac{\rho_\beta(\bar{x}-\bar{x}_0, \bar{r}-\bar{r}_0)}{\rho_\beta(x_i-\bar{x}_0, r_i-\bar{r}_0)} \quad (6.24)$$

mit

$$\bar{r}_0 = -i \frac{2\Lambda \dot{A}(t) + S(t)}{2A(t)} x_i + i \frac{M}{\hbar} \left[2\Lambda \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}^2(t)}{A(t)} \right) + \left(\dot{S}(t) - \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} S(t) \right) \right] x_f \quad (6.25)$$

und

$$\bar{x}_0 = \left[1 - \frac{\dot{S}(t)}{2\Omega A(t)} \right] x_i - \frac{M}{\hbar \Lambda} \left[\dot{S}(t) \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - \ddot{S}(t) \right] x_f, \quad (6.26)$$

so ergibt sich nämlich

$$G_2(x_i, r_i, t, x_f) = \int d\bar{x} d\bar{r} \frac{\rho_\beta(\bar{x}-\bar{x}_0, \bar{r}-\bar{r}_0)}{\rho_\beta(x_i-\bar{x}_0, r_i-\bar{r}_0)} \lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}). \quad (6.27)$$

Für die Gleichgewichtspräparation (6.18) findet man also tatsächlich $G_2=1$. Die weitere Integration führt dann mit (6.21) auf $G_1=1$, womit letztendlich in (6.17) die Gleichgewichtsdichtematrix resultiert.

In (6.19) führt man die Integration in zwei Schritten aus, wobei zunächst über x_i zu integrieren ist. Wir definieren daher noch eine weitere Zerlegung, bei der bezüglich $x_i - x_i^0$ quadratisch ergänzt wird. Aus (6.19) wird

$$G_1(x_f, r_f, t) = \int dr_i \exp \left[\left(-\frac{\hbar}{2M} \frac{\Lambda}{\hbar^2 \Lambda^2 / M^2 - S^2(t)} \right) (r_i - r_i^0)^2 \right] G_3(r_i, t, x_f) \quad (6.28)$$

mit der Funktion

$$G_3(r_i, t, x_f) = \frac{1}{4\pi|A(t)|} \int dx_i \exp\left[-\frac{\hbar\Lambda}{8MA^2(t)} \left(1 - \frac{M^2S^2(t)}{\hbar^2\Lambda^2}\right) \cdot \left[(x_i - x_i^0) + i\frac{2S(t)A(t)}{\hbar^2\Lambda^2/M^2 - S^2(t)} (r_i - r_i^0)\right]^2\right] G_2(x_i, r_i, t, x_f). \quad (6.29)$$

Beginnen wir mit der Auswertung der Integrale bei (6.28). Unter Berücksichtigung der Verschiebung (6.22) erhalten wir für lange Zeiten

$$G_1(x_f, r_f, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left[\frac{M}{2\hbar\Lambda}(z - i\Lambda\frac{\dot{S}}{S}x_f)^2\right] \frac{MS(t)}{\hbar\Lambda} G_3\left(\frac{MS(t)}{\hbar\Lambda}(z+r_f), t, x_f\right). \quad (6.30)$$

Dabei ist \dot{S}/S das Verhältnis von $\dot{S}(t)$ zu $S(t)$ für $t \rightarrow \infty$. Für lange Zeiten zerfällt das Integral in zwei Anteile. Im ersten Anteil läuft z von $-\infty$ bis $-r_f$ und das erste Argument von G_3 ist $-\infty$, während im zweiten Anteil z von $-r_f$ bis ∞ läuft und das erste Argument von G_3 gleich ∞ ist. Man kann die Zerlegung auch so vornehmen, daß ein Anteil durch den kleineren Wert von $G_3(\infty, \dots)$ und $G_3(-\infty, \dots)$ bestimmt ist, wobei das Integral (6.30) nur eine Zahl ergibt. Dies führt nach (6.17) auf die kanonische Dichtematrix. Der zweite Anteil hängt von der Differenz von $G_3(-\infty, \dots)$ und $G_3(\infty, \dots)$ ab und sollte daher mit der Flußlösung zusammenhängen. Betrachtet man G_3 für die Argumente in (6.30), so stellt man in (6.29) fest, daß G_2 für lange Zeiten nur bei $x_i=0$ einen Beitrag liefert. Es gilt im Grenzfall langer Zeiten

$$\frac{MS(t)}{\hbar\Lambda} G_3\left(\frac{MS(t)}{\Lambda}(z+r_f), t, x_f\right) = \left[-\frac{M}{2\pi\hbar\Lambda}\right]^{1/2} G_2\left(0, \frac{MS(t)}{\hbar\Lambda}(z+r_f), t, x_f\right). \quad (6.31)$$

Für $x_i=0$ und $r_i \rightarrow \pm\infty$ hat die Präparationsfunktion nach unseren früheren Überlegungen die Form

$$\lambda(x_i, r_i, \bar{x}, \bar{r}) = f(\pm\infty)\delta(x_i - \bar{x})\delta(r_i - \bar{r}), \quad (6.32)$$

und damit ist G_2 , abhängig vom Vorzeichen von $z+r_f$, für lange Zeiten $f(\pm\infty)$. Wenn wir diese Resultate in (6.30) einsetzen, finden wir schließlich für beliebige Anfangspräparation die stationäre Dichtematrix

$$\rho_{\text{st}}(\mathbf{x}_f, \mathbf{r}_f) = \rho_\beta(\mathbf{x}_f, \mathbf{r}_f) \left\{ f(\infty) + \frac{1}{2}(f(-\infty) - f(\infty)) \operatorname{erfc} \left[\left[-\frac{M}{2\hbar\Lambda} \right]^{1/2} \left(\mathbf{r}_f + i\Lambda \frac{\dot{\mathbf{S}}}{S} \mathbf{x}_f \right) \right] \right\}, \quad (6.33)$$

wobei $\operatorname{erfc}(x)$ das Komplement der Fehlerfunktion ist. Die kanonische Dichtematrix ist gegeben durch

$$\rho_\beta(\mathbf{x}_f, \mathbf{r}_f) \sim \exp \left[-\frac{M}{2\hbar\Lambda} r_f^2 - \frac{M\Omega}{2\hbar} x_f^2 \right]. \quad (6.34)$$

Wie erwartet spaltet die Lösung (6.33) in zwei Beiträge auf. Der erste Anteil liegt vor, wenn auf beiden Seiten der Barriere eine nichtverschwindende Besetzung vorliegt. Für lange Zeiten liefert dieser Anteil die kanonische Dichtematrix. Der zweite Anteil tritt nur auf, wenn beide Seiten verschieden stark besetzt sind. Nehmen wir die gleichen Randbedingungen wie in der klassischen Theorie, also $f(-\infty)=1$ und $f(\infty)=0$, so erhalten wir die stationäre Flußlösung

$$\rho_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{r}_f) = \rho_\beta(\mathbf{x}_f, \mathbf{r}_f) \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\left[-\frac{M}{2\hbar\Lambda} \right]^{1/2} \left(\mathbf{r}_f + i\Lambda \frac{\dot{\mathbf{S}}}{S} \mathbf{x}_f \right) \right]. \quad (6.35)$$

Bevor wir im nächsten Abschnitt den zu (6.35) gehörigen Fluß und daraus die Zerfallsrate eines metastabilen Zustands berechnen, wollen wir noch überprüfen, ob sich im klassischen Limes die Kramers-Flußlösung ergibt. Dazu berechnen wir aus der Dichtematrix (6.35) die zugehörige Wignerfunktion

$$\tilde{W}(\mathbf{v}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{x}_f \rho(\mathbf{x}_f, \mathbf{q}) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} M \mathbf{v} \mathbf{x}_f \right], \quad (6.36)$$

die die Verteilung für Ort \mathbf{q} und Geschwindigkeit \mathbf{v} beschreibt. Durchführung der Transformation liefert

$$\tilde{W}_F(\mathbf{v}, \mathbf{q}) = \tilde{W}_\beta(\mathbf{v}, \mathbf{q}) \frac{1}{2\pi\hbar} (-\Lambda a^2 - \Omega)^{-1/2} \Omega^{-1/2} \int_{-\infty}^{\mathbf{v}-a\mathbf{q}} d\mathbf{w} \exp \left[-\frac{M}{2\hbar(-\Lambda a^2 - \Omega)} \mathbf{w}^2 \right] \quad (6.37)$$

mit der Wignertransformierten der kanonischen Dichtematrix

$$\bar{W}_\beta(v, q) \sim \exp\left[-\frac{M}{2\hbar}\left(\frac{q^2}{\Lambda} + \frac{v^2}{\Omega}\right)\right] \quad (6.38)$$

und der Abkürzung

$$a = -\frac{\Omega}{\Lambda} \frac{S}{\dot{S}}. \quad (6.39)$$

Im klassischen Limes, also für große Temperaturen, folgt aus (6.8) und (6.10)

$$\Lambda = -\frac{k_B T}{\hbar \omega_b^2}, \quad (6.40)$$

$$\Omega = \frac{k_B T}{\hbar}, \quad (6.41)$$

und für den Spezialfall ohmscher Dämpfung gilt

$$\frac{\dot{S}}{S} = \left(\omega_b^2 + \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} - \frac{\gamma}{2}. \quad (6.42)$$

Einsetzen in (6.37) ergibt genau den Ausdruck (6.5) für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(q, v)$ der Kramers-Theorie. Insbesondere stimmt die obere Integrationsgrenze in (6.37) genau mit der in (6.6) definierten Kramers-Variablen u überein. Die quantenmechanische Verallgemeinerung der Kramers-Variablen lautet somit

$$u = v + \frac{\Omega}{\Lambda} \frac{S}{\dot{S}} q. \quad (6.43)$$

Ihr Ursprung läßt sich zurückverfolgen bis zur Verschiebung r_1^0 in (6.22), die wesentlich die Korrekturfunktion G_1 beeinflusst und, wie die klassische Kramers-Variable, angibt, von wo die wichtigen Beiträge stammen, die das Verhalten am Barrierenmaximum bestimmen.

6.4. Berechnung der Zerfallsrate

In den vorhergehenden Abschnitten haben wir den Transport über eine rein parabolische Barriere studiert und insbesondere die stationäre Fluß-Lösung (6.35) abgeleitet. Im folgenden wollen wir davon ausgehen, daß ein metastabiles Potential wie in Abbildung 2 vorliegt. Die Besetzung in der Mulde ermöglicht dann, daß tatsächlich ein Fluß über die Barriere auftritt. Um den Zerfall in einem solchen Potential zu beschreiben, müssen wir jetzt unsere Fluß-Lösung mit der Gleichgewichtsverteilung in der Mulde, die wir durch einen harmonischen Oszillator nähern, in Verbindung bringen. Dazu berechnen wir die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit

$$P(q) = \int \mathcal{D}\bar{q} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{\text{eff}}[\bar{q}]\right] \quad (6.44)$$

für das metastabile Potential in harmonischer Näherung. Die zugelassenen Wege erfüllen die Randbedingungen $\bar{q}(0) = \bar{q}(\hbar\beta) = q$. Die effektive Wirkung ist durch den Exponenten in (2.66) gegeben, da $P(q)$ gerade der Diagonaleil der Dichtematrix ist. Setzen wir nun

$$\bar{q}(\tau) = q + \eta(\tau), \quad (6.45)$$

so können wir das Potential bis zur zweiten Ordnung entwickeln. Die effektive Wirkung in harmonischer Näherung lautet dann

$$S_{\text{eff}}^h = V(q)\hbar\beta + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{M}{2}\dot{\eta}^2 + V'(q)\eta + \frac{1}{2}V''(q)\eta^2 \right] \\ + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau-\sigma)\eta(\tau)\eta(\sigma), \quad (6.46)$$

wobei das Funktionalintegral jetzt über alle Wege geht, die bei $\eta=0$ beginnen und enden. Durch einen Fourieransatz für $\eta(\tau)$ läßt sich das Funktionalintegral lösen und man erhält

$$P(q) = \left(\frac{M}{\hbar\beta\Lambda(q)V''(q)} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^2\beta\pi}{M\nu_n^2 + M\zeta_n + V''(q)} \cdot \exp\left[-\beta\left[V(q) - \frac{V'^2(q)}{2V''(q)}\left(1 - \frac{M}{\hbar\beta\Lambda(q)V''(q)}\right)\right]\right]. \quad (6.47)$$

Als Verallgemeinerung der in (5.4) und (6.8) definierten Größe Λ haben wir

$$\Lambda(q) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\nu_n^2 + \zeta_n + V''(q)/M} \quad (6.48)$$

gesetzt. Wenn wir für die Mulde bei $q=0$ und die Barriere bei $q=q_b$ ein harmonisches bzw. parabolisches Potential ansetzen, erhalten wir unter Verwendung der Bezeichnungen in Abbildung 2 in der Mulde

$$P_0(q) = \frac{1}{\omega_0} \left(\frac{M}{\hbar\beta\Lambda(0)} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^2\beta\pi}{M(\nu_n^2 + \zeta_n + \omega_0^2)} \exp\left[-\frac{M}{2\hbar\Lambda(0)} q^2\right] \quad (6.49)$$

und an der Barriere

$$P_b(q) = \frac{1}{\omega_b} \left(\frac{M}{\hbar\beta\Lambda(q_b)} \right)^{1/2} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^2\beta\pi}{M(\nu_n^2 + \zeta_n - \omega_b^2)} \exp\left[-\beta V_b - \frac{M}{2\hbar\Lambda(q_b)} q^2\right]. \quad (6.50)$$

Bei der Berechnung von $P_b(q)$ ist zu beachten, daß $V''(q)\Lambda(q)>0$ vorauszusetzen ist, was in dem von uns betrachteten Temperaturbereich gewährleistet ist, da dort $\Lambda(q)<0$ ist.

Aus der stationären Fluß-Lösung $\tilde{w}_F(v, q)$ in (6.37) können wir den zugehörigen Fluß

$$J_F = M^2 \int dv v \tilde{w}_F(v, q) \quad (6.51)$$

und die zugehörige Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit

$$P_F(q) = M \int dv \tilde{W}_F(v, q) \quad (6.52)$$

berechnen. Der tatsächliche Fluß bezogen auf die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeiten (6.49) und (6.50) ergibt sich dann zu

$$J_0 = J_F \frac{P_b(q)}{P_F(q)} = \frac{1}{\omega_b} (2\pi\beta)^{-1} \frac{\dot{S}}{S} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^2 \beta \pi}{M(\nu_n^2 + \zeta_n - \omega_b^2)} \exp(-\beta V_b). \quad (6.53)$$

Bei der Anbindung der Fluß-Lösung an die Muldenverteilung ist, wie schon im klassischen Fall, zu beachten, daß in dem Bereich, in dem eine wesentliche Muldenbesetzung vorhanden ist, die Korrekturfunktion G_1 in (6.17) praktisch den konstanten Wert links der Barriere annehmen muß. Die durch Λ gegebene Breite der Fluß-Lösung muß also klein gegenüber dem Abstand q_b der Barriere von der Mulde sein. Dies ist die zweite Annahme, die wir bei unsere Rechnung machen müssen, neben der, daß in der Mulde eine Gleichgewichtsverteilung vorliegt.

Die Zerfallsrate Γ erhalten wir schließlich, indem wir diesen Fluß durch die Muldenbesetzung, also das Integral über (6.49), dividieren. Das Endresultat lautet dann

$$\Gamma = \frac{\omega_0}{\omega_b} \frac{\omega_R}{2\pi} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2 + \zeta_n + \omega_0^2}{\nu_n^2 + \zeta_n - \omega_b^2} \exp(-\beta V_b), \quad (6.54)$$

wobei wir wegen (6.14)

$$\frac{\dot{S}}{S} = \omega_R \quad (6.55)$$

gesetzt haben. Dieses Ergebnis stimmt vollkommen mit (3.24) und (3.25) unserer Imaginärzeitrechnung im dritten Kapitel überein, so daß die dortige Diskussion der Zerfallsrate gültig bleibt. Allerdings ist der Temperaturbereich, in dem wir (6.54) für die Realzeitrechnung verwenden

dürfen, wegen der Forderung $\Lambda < 0$ gegenüber der Imaginärzeitrechnung eingeschränkt. Interessanterweise stimmen die Ergebnisse sogar bis zur crossover-Temperatur überein, obwohl in der Realzeitrechnung bei Beschränkung auf die parabolische Näherung keine sinnvolle Ortsverteilung mehr möglich ist.

Die Berücksichtigung von Anharmonizitäten in der Realzeitrechnung wird zeigen, ob sich für Temperaturen, für die $\Lambda > 0$ ist, ein Unterschied zum Imaginärzeitresultat ergibt. Wir werden diese Rechnung hier nicht durchführen, wollen aber im folgenden Abschnitt zum Abschluß andeuten, was beim Übergang in den anharmonischen Bereich qualitativ passiert.

6.5. Der Übergang zu tieferen Temperaturen

Im Abschnitt 6.2. hatten wir bei der Diskussion von Λ festgestellt, daß bei der parabolischen Barriere in Imaginärzeit ein Kaustiken-Problem auftritt. Dabei war das Auftreten konjugierter Punkte eng damit verknüpft, daß das Potential höchstens quadratische Terme enthielt. Für genügend hohe Temperaturen, bei denen $\Lambda < 0$ ist, ergibt sich kein Problem. Die von uns gemachte harmonische Näherung ist dort zulässig. Sobald Λ verschwindet oder positiv wird, muß die Anharmonizität des Potentials berücksichtigt werden. Da Λ eng mit der Ortsverteilung verknüpft ist, wollen wir uns im folgende qualitativ überlegen, was aus Wegen, die am selben Ort beginnen und enden, wird, wenn Λ sein Vorzeichen wechselt.

Da die parabolische Barriere in Imaginärzeit dem harmonischen Oszillator in Realzeit entspricht, betrachten wir letzteren, da dies unserer Anschauung entgegenkommt. Untersucht man die möglichen Wege in Abhängigkeit von der Zeit t , die sie benötigen, um wieder an den Ausgangspunkt zurückzukehren, so gibt es Punkte, die durch das Vielfache der halben Periodendauer gegeben sind und bei denen sich das Verhalten ändert. Diese Punkte sind im ungedämpften wie auch im gedämpften Fall dadurch charakterisiert, daß der Eigenwert einer Fluktuation um den klassischen Weg sein Vorzeichen wechselt. Wir hatten dies bereits im dritten Kapitel festgestellt. Dort deutete $\lambda_1^b = 0$ das Auftreten der Bounce-Lösung an. Der Vorzeichenwechsel des Eigenwerts einer Fluktuationsmode ist mit einem Stabilitätswechsel verbunden. War die klassische Trajektorie für kurze Zeiten oder hohe Temperaturen ein Minimum der Wirkung, so gehört die entsprechende Trajektorie nach dem Vorzeichenwechsel zu einem Maximum

der Wirkung. Dazwischen tritt ein konjugierter Punkt auf. Ein Weg, der im Potentialminimum startet, muß im allgemeinen dort bleiben. Nur wenn ein konjugierter Punkt auftritt, kann er sich aus dem Minimum entfernen, dann jedoch mit beliebiger Amplitude. Startet man nicht im Minimum, so gibt es fast immer eine eindeutige Trajektorie mit einer bestimmten Anfangsgeschwindigkeit. Tritt zum ersten Mal ein konjugierter Punkt auf, so gibt es keine zulässige klassische Trajektorie, da sich alle Wege auf der anderen Seite des Potentialminimums treffen. Beim zweiten Auftreten eines konjugierten Punktes sind Wege mit beliebiger Amplitude zugelassen.

Das Auftreten konjugierter Punkte und die damit verbundenen Schwierigkeiten hängen damit zusammen, daß im harmonischen Potential die Schwingungsdauer unabhängig von der Amplitude ist. Oberhalb der kritischen Zeit oder unterhalb der kritischen Temperatur, bei der zum ersten Mal ein konjugierter Punkt auftritt, müssen wir deshalb die Anharmonizität des Potentials berücksichtigen.

Wir interessieren uns im folgenden für den Punkt, an dem der Eigenwert λ_1 der niedrigsten Fluktuationsmode sein Vorzeichen wechselt, da dadurch der Gültigkeitsbereich der Rechnung in den vorhergehenden Abschnitten bestimmt wird. Aus der Forderung, daß die gesuchte Trajektorie klassisch, also ein Extremum der Wirkung sei, und an einem Punkt q beginne und ende, läßt sich die Amplitude a_1 der niedrigsten Fluktuationsmode bestimmen. Die sich ergebenden Resultate sind aus der Theorie singularer Störungen [77] bekannt. Wir betrachten speziell den symmetrischen Doppeltopf, der aus der parabolischen Barriere durch Hinzufügen eines quartischen Terms entsteht. In Realzeit untersuchen wir also die Bewegung im invertierten Doppeltopf der Abbildung 14. In Abbildung 15 ist das Verhalten der Amplitude a_1 in Abhängigkeit von der Temperatur,

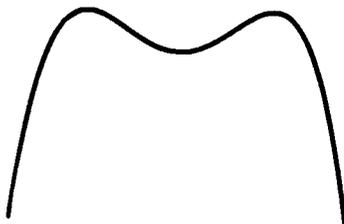


Abb. 14: Invertiertes Doppeltopfpotential

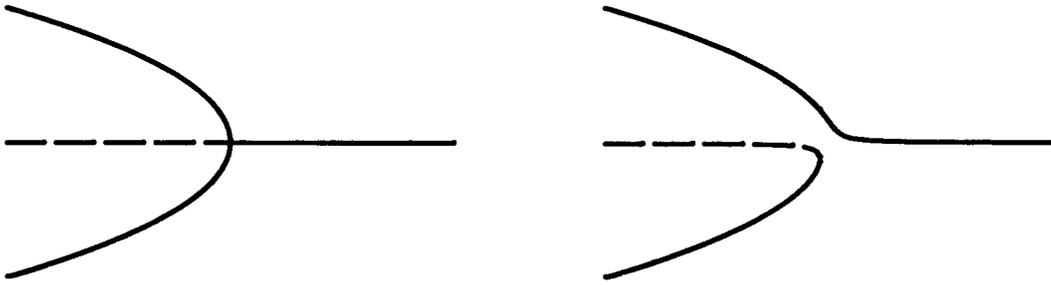


Abb. 15: Amplitude a_1 der niedrigsten Fluktuationsmode im Doppelpotf. Die Temperatur nimmt von links nach rechts zu. Stabile Lösungen sind durchgezogen, instabile Lösungen sind gestrichelt. Im linken Bild liegt der Ausgangspunkt im Potentialminimum, im rechten Bild etwas außerhalb.

die nach links abnimmt, dargestellt. Im linken Bild betrachten wir Trajektorien, die vom Minimum in Abbildung 14 ausgehen. Solange die Temperatur groß genug ist, bleibt die Trajektorie im Minimum, da die benötigte Zeit für einen Ausflug größer ist als die halbe Periodendauer einer Schwingung im harmonisch genäherten Potential. Nach dem Vorzeichenwechsel des Eigenwerts λ_1 wird die Lösung instabil. Es kommt zu einer Bifurkation, bei der symmetrisch zwei weitere Lösungen entstehen, die halbe Schwingungen im anharmonischen Potential darstellen. Im rechten Bild liegt der Ausgangspunkt etwas außerhalb der Minimums. In invertierten Potential gibt es bei hohen Temperaturen dann nur die Möglichkeit einer Bewegung in Richtung der Barriere. Diese Lösung ist immer stabil. Bei genügend tiefen Temperaturen sind auch zwei Schwingungslösungen auf die andere Seite der Mulde möglich. Dabei gibt es eine langsame Lösung, die nur einen kleinen Bereich des Potentials durchläuft und instabil ist. Die zweite Lösung hat eine größere Anfangsgeschwindigkeit und läuft bis zur gegenüberliegenden Barriere. Diese Lösung ist stabil.

Bei der Auswertung von Funktionalintegralen sind im anharmonischen Bereich die neuen stabilen Lösungen zu berücksichtigen. Dabei ist es abhängig von den zugehörigen Wirkungen notwendig, beide Lösungen zu berücksichtigen, oder es genügt, die Lösung mit der kleineren Wirkung mitzunehmen.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir an vier verschiedenen Problemen die Anwendung von Funktionalintegralen auf dissipative Quantensysteme diskutiert, wobei wir sowohl von Imaginär- als auch Realzeitmethoden Gebrauch gemacht haben. Wir haben dabei gezeigt, daß Funktionalintegrale ein geeignetes Mittel sind, um Dissipation ohne Einschränkungen an Temperatur oder Dämpfungsstärke in die Quantenmechanik einzuführen. Einige unserer Resultate, die zuerst mit Funktionalintegralen erhalten wurden, sind inzwischen auch mit anderen Methoden reproduziert worden.

Der Zerfall metastabiler Systeme wurde in Imaginärzeit untersucht. Zur Zeit existiert noch kein strenger Beweis für die Anwendbarkeit der analytischen Fortsetzung, die wir machen mußten, um die Zerfallsrate zu berechnen. Experimente an Josephsonkontakten sind jedoch in Übereinstimmung mit den Vorhersagen der Theorie. Im Bereich der Quantenkorrekturen, dem unser Interesse galt, werden die Resultate außerdem durch unsere Realzeitrechnung bestätigt. Gedächtniseigenschaften der Dämpfung zeigten einen starken Einfluß auf die Zerfallsrate. Unsere diesbezüglichen Ergebnisse sollten bei der Interpretation von Experimenten, beispielsweise bei der Messung von Reaktionsraten, von Nutzen sein.

Um ein Experiment an granularen Supraleitern zu verstehen, zeigten wir mit Hilfe eines speziellen Modells und einer Variationsrechnung, daß Dissipation eine wesentliche Rolle in diesen Systemen spielt und sogar einen Phasenübergang treiben kann. Ob das von uns verwendete RSJ-Modell oder vielleicht ein Modell mit Quasiteilchentunneln zur richtigen Beschreibung des Experiments führt, ist zur Zeit noch ungeklärt. Weitere theoretische und experimentelle Arbeit ist nötig, um dies zu entscheiden und auch um Unterschiede zwischen dem Minnesota-Experiment und anderen Experimenten zu verstehen. Des weiteren sind Experimente an regelmäßigen Anordnungen von RSJ-Kontakten denkbar, die unsere Vorhersagen testen könnten.

Im Rahmen der Realzeitrechnung machten wir Gebrauch von dem gemeinsam mit Grabert und Schramm entwickelten Influenzfunktional, das nicht auf der Faktorisierungsannahme beruht und daher eine sehr große Klasse von Anfangszuständen zuläßt. Dabei werden insbesondere anfängliche Kor-

relationen zwischen System und Wärmebad berücksichtigt.

Die erste Anwendung, das freie Brownsche Teilchen, zeigte eine große Vielfalt von verschiedenen Verhaltensweisen in Abhängigkeit von der Niederfrequenzstruktur des Bades. Neben anomaler Diffusion ergab sich unter bestimmten Bedingungen Lokalisierung, wobei ein anfänglich lokalisierter Zustand für alle Zeiten lokalisiert bleibt. Des weiteren zeigte sich, daß das freie Brownsche Teilchen nicht notwendigerweise für lange Zeiten den Gleichgewichtszustand annimmt.

Mit der Diskussion der parabolischen Barriere in Realzeit haben wir die Kramers-Theorie in den Quantenbereich fortgesetzt. Die Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit denen der ebenfalls diskutierten Imaginärzeitrechnung. Die Fortsetzung in den Bereich, in dem Anharmonizitäten eine Rolle spielen, wurde angedeutet. Es ist nicht zu erwarten, daß in diesem Bereich weitergehende Aussagen über Gleichgewichtsraten als in der Imaginärzeitrechnung möglich sind. Neben der Überprüfung und Begründung der Resultate anderer Theorien erlaubt die Realzeitrechnung als Methode zur Beschreibung der Dynamik jedoch auch die Untersuchung von Systemen unter dem Einfluß äußerer Kräfte. Die Fortsetzung der dargestellten Arbeit sollte es daher ermöglichen, beispielsweise die Experimente an Josephsonkontakten unter dem Einfluß von Mikrowellen [78] zu verstehen. Wegen der Möglichkeit, auch die Dynamik zu beschreiben, wird die Realzeitrechnung sicher in der Zukunft noch weitere interessante Ergebnisse liefern.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] R.P.Feynman, Rev.Mod.Phys.20,367(1948)
- [2] R.P.Feynman, A.R.Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965
- [3] A.O.Caldeira, A.J.Leggett, Phys.Rev.Lett.46,211(1981)
- [4] A.O.Caldeira, A.J.Leggett, Ann.Phys.(N.Y.)149,374(1983);
153,445(E)(1984)
- [5] A.O.Caldeira, A.J.Leggett, Physica 121A,587(1983); 130A,374(E)(1985)
- [6] H.Dekker, Phys.Rep.80,1(1981)
- [7] H.Haken, *Light and Matter Ic*, in: Handbuch der Physik, Bd.XXV/2c Springer, Heidelberg, 1969
W.H.Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, Wiley, New York, 1973
F.Haake, *Statistical Treatment of Open Systems by Generalized Master Equations*, Springer Tracts in Modern Physics, Bd.66, Hrsg. G.Höhler, Springer, Heidelberg, 1973
H.Haken, Rev.Mod.Phys.47,67(1975)
E.B.Davies, *Quantum Theory of Open Systems*, Academic Press, London, 1976
H.Grabert, *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Springer Tracts in Modern Physics, Bd.95, Hrsg. G.Höhler Springer, Berlin, 1982
P.Talkner, Ann.Phys.(N.Y.)167,390(1986)
- [8] H.Haken, W.Weidlich, Z.Phys.205,96(1967)
R.Bonifacio, P.Schwendimann, F.Haake, Phys.Rev.A4,302,854(1971)
- [9] A.Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Oxford Univ., London, 1961
C.P.Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Springer Series in Solid-State Sciences Bd.1, Hrsg. P.Fulde, Springer, Berlin, 1978
P.N.Argyres, P.L.Kelley, Phys.Rev.134,A98(1964)
- [10] S.Washburn, R.A.Webb, Ann.N.Y.Acad.Sci.480,66(1986)
und dortige Referenzen
- [11] H.Grabert, in: *SQUID'85 Superconducting Quantum Interference Devices and their Applications*, Hrsg. H.D.Hahlbohm und H.Lübbig, de Gruyter, Berlin, 1985

- [12] R.P.Feynman, F.L.Vernon, *Ann.Phys.(N.Y.)* **24**,118(1963)
- [13] S.Arrhenius, *Z.Phys.Chem.* **4**,226(1889)
- [14] G.Gamow, *Z.Phys.* **51**,204(1928)
- [15] H.A.Kramers, *Physica(Utrecht)* **7**,284(1940)
- [16] P.Hanggi, *J.Stat.Phys.* **42**,105(1986)
- [17] R.DiFoggio, R.Gomer, *Phys.Rev.* **B25**,3490(1982)
- [18] A.Seeger, in: *Proceedings of the 7th International Conference on Positron Annihilation*, Neu Dehli, 1985
und dortige Referenzen
- [19] H.Frauenfelder, in: *Tunnelling in Biological Systems*,
Hrsg. B.Chance *et al*, Academic Press, New York, 1979
- [20] J.S.Langer, *Ann.Phys.(N.Y.)* **41**,108(1967)
- [21] I.Affleck, *Phys.Rev.Lett.* **46**,388(1981)
- [22] B.G.Orr, H.M.Jaeger, A.M.Goldman, C.G.Kuper,
Phys.Rev.Lett. **56**,378(1986); **56**,996(E)(1986)
B.G.Orr, H.M.Jaeger, A.M.Goldman, *Phys.Rev.* **B32**,7586(1986)
- [23] H.M.Jaeger, D.B.Haviland, A.M.Goldman, B.G.Orr,
Phys.Rev. **B34**,4920(1986)
- [24] H.M.Jaeger, Thesis, University of Minnesota, Minneapolis, 1987
- [25] P.Schramm, Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1987
- [26] H.Grabert, P.Schramm, G.-L.Ingold, *Phys.Rep.* **168**,115(1988)
- [27] A.Schmid, *Phys.Rev.Lett.* **51**,1506(1983)
F.Guinea, V.Hakim, A.Muramatsu, *Phys.Rev.Lett.* **54**,263(1985)
M.P.A.Fisher, W.Zwenger, *Phys.Rev.* **B32**,6190(1985)
U.Weiss, M.Wollensak, *Phys.Rev.* **B37**,2729(1988)
- [28] V.Hakim, V.Ambegaokar, *Phys.Rev.* **A32**,423(1985)
- [29] C.Aslangul, N.Pottier, D.Saint-James, *J.Physique* **48**,1871(1987)
C.Aslangul, N.Pottier, D.Saint-James, *Phys.Lett.* **A123**,413(1987)
- [30] L.Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*,
Wiley, New York, 1981
- [31] B.Felsager, *Geometry, Particles, and Fields*, Odense University
Press, Odense, 1981
- [32] R.Kubo, *Rep.Progr.Phys.(London)* **29**,255(1966)
- [33] R.J.Rubin, *J.Math.Phys.* **1**,309(1960); **2**,373(1961)
- [34] L.-D.Chang, S.Chakravarty, *Phys.Rev.* **B31**,154(1985)

- [35] H.Teichler, A.Seeger, Phys.Lett.**82A**,91(1981)
- [36] G.Ludwig, *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik*,
Bd.3, Vieweg, Braunschweig, 1976
W.Weidlich, Z.Phys.**205**,199(1967)
- [37] P.Schramm, H.Grabert, Phys.Rev.**A34**,4515(1986)
- [38] D.Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and
Correlation Functions*, Benjamin, Reading, 1975
- [39] P.Hänggi, Z.Phys.**B68**,181(1987)
- [40] N.Alberding *et al*, Science **192**,1002(1976)
- [41] C.Callan, S.Coleman, Phys.Rev.**D16**,1762(1977)
- [42] P.Olschowski, Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1986
H.Grabert, P.Olschowski, U.Weiss, Phys.Rev.**B36**,1931(1987)
H.Grabert, P.Olschowski, U.Weiss, Z.Phys.**B68**,193(1987)
- [43] H.Grabert, U.Weiss, Phys.Rev.Lett.**53**,1787(1984)
- [44] P.Hänggi, H.Grabert, G.-L.Ingold, U.Weiss, Phys.Rev.Lett.**55**,761(1985)
- [45] E.Wigner, Z.Phys.Chem.**B19**,203(1932)
- [46] A.N.Cleland, J.M.Martinis, J.Clark, Phys.Rev.**B37**,5950(1988)
- [47] B.Mühlschlegel, D.J.Scalapino, R.Denton, Phys.Rev.**B6**,1767(1972)
- [48] B.Abeles, Phys.Rev.**B15**,2828(1977)
E.Šimánek, Phys.Rev.**B22**,459(1980)
K.B.Efetov, Zh.Eksp.Teor.Fiz.**78**,2017(1980)
[Sov.Phys.JETP **51**,1015(1980)]
D.M.Wood, D.Stroud, Phys.Rev.**B25**,1600(1982)
R.M.Bradley, S.Doniach, Phys.Rev.**B30**,1138(1984)
- [49] D.E.McCumber, J.Appl.Phys.**39**,3113(1968)
W.C.Stewart, J.Appl.Phys.**45**,452(1968)
A.Barone, G.Paterno, *Physics and Applications of the Josephson Effect*,
Wiley, New York, 1982
- [50] S.Chakravarty, S.Kivelson, G.Zimanyi, B.I.Halperin,
Phys.Rev.**B35**,7256(1987)
A.Kampf, G.Schön, Phys.Rev.**B36**,3651(1987)
- [51] S.Chakravarty, G.-L.Ingold, S.Kivelson, A.Luther,
Phys.Rev.Lett.**56**,2303(1986)
- [52] E.Šimánek, R.Brown, Phys.Rev.**B34**,3495(1986)
M.P.A.Fisher, Phys.Rev.**B36**,1917(1987)
S.V.Panyukov, A.D.Zaikin, Phys.Lett.**124A**,325(1987)

- [53] W.Zwerger, *Solid State Comm.* **62**,285(1987)
- [54] S.Chakravarty, G.-L.Ingold, S.Kivelson, G.Zimanyi,
Phys.Rev. **B37**,3283(1988)
- [55] S.Chakravarty, *Phys.Rev.Lett.* **49**,681(1982)
A.J.Bray, M.A.Moore, *Phys.Rev.Lett.* **49**,1545(1982)
- [56] P.W.Anderson, G.Yuval, D.R.Hamann, *Phys.Rev.* **B1**,4464(1970)
- [57] P.W.Anderson, in: *Lectures on the Many-Body Problem*, Bd. 2,
Hrsg. E.R.Caianello, Academic Press, New York, 1964
- [58] Beiträge zum NATO Advanced Research Workshop "*Coherence in
Superconducting Networks*", *Physica* **B152**, Heft 1 & 2 (1988)
- [59] M.Kunchur, P.Lindenfeld, W.L.McLean, J.S.Brooks,
Phys.Rev.Lett. **59**,1232(1987)
M.Kunchur, Y.Z.Zhang, P.Lindenfeld, W.L.McLean, J.S.Brooks,
Phys.Rev. **B36**,4062(1987)
- [60] R.P.Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin, Reading, 1972
- [61] M.P.A.Fisher, *Phys.Rev.Lett.* **57**,885(1986)
B.G.Orr, J.R.Clem, H.M.Jaeger, A.M.Goldman, *Phys.Rev.* **B34**,3491(1986)
M.Fibich, C.G.Kuper, M.Revzen, A.Ron, *J.Low Temp.Phys.* **69**,459(1987)
U.Eckern, F.Pelzer, *Europhys.Lett.* **3**,131(1987)
- [62] V.Ambegaokar, A.Baratoff, *Phys.Rev.Lett.* **10**,486(1963)
- [63] V.Ambegaokar, B.I.Halperin, J.S.Langer, *Phys.Rev.* **B4**,2612(1971)
- [64] J.M.Kosterlitz, D.J.Thouless, *J.Phys.* **C6**,1181(1973)
J.M.Kosterlitz, *J.Phys.* **C7**,1046(1974)
- [65] K.Epstein, A.M.Goldman, A.M.Kadin, *Phys.Rev.Lett.* **47**,534(1981)
- [66] A.E.White, R.C.Dynes, J.P.Garno, *Phys.Rev.* **B33**,3549(1986)
- [67] R.S.Markiewicz, *Phys.Rev.* **B37**,644(1988)
- [68] H.Grabert, U.Weiss, P.Talkner, *Z.Phys.* **B55**,87(1984)
P.S.Riseborough, P.Hanggi, U.Weiss, *Phys.Rev.* **A31**,471(1985)
F.Haake, R.Reibold, *Phys.Rev.* **A32**,2462(1985)
- [69] R.Jung, G.-L.Ingold, H.Grabert, *Phys.Rev.* **A32**,2510(1985)
- [70] G.-L.Ingold, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1985
- [71] P.Talkner, *Z.Phys.* **B41**,365(1981)
- [72] H.B.Callen, T.A.Welton, *Phys.Rev.* **83**,34(1951)
- [73] H.Grabert, P.Schramm, G.-L.Ingold, *Phys.Rev.Lett.* **58**,1285(1987);
58,2386(E)(1987)
- [74] P.Schramm, H.Grabert, *J.Stat.Phys.* **49**,767(1987)

- [75] R.F.Grote, J.T.Hynes, *J.Chem.Phys.* **73**,2715(1980)
P.Hanggi, F.Mojtabai, *Phys.Rev.A* **26**,1168(1982)
B.Carmeli, A.Nitzan, *Phys.Rev.A* **29**,1481(1984)
J.E.Straub, M.Borkovec, B.Berne, *J.Chem.Phys.* **84**,1788(1986)
- [76] O.Klein, *Ark.Mat.Astr.Fys.* **16**(5),1(1922)
- [77] B.J.Matkowsky, E.L.Reiss, *SIAM J.Appl.Math.* **33**,230(1977)
G.Iooss, D.D.Joseph, *Elementary Stability and Bifurcation Theory*,
Springer, New York, 1980
- [78] M.H.Devoret, J.M.Martinis, D.Estève, J.Clarke,
Phys.Rev.Lett. **53**,1260(1984)

LEBENS LAUF

- 21.12.1960 geboren in Stuttgart als erstes von drei Kindern des Geschäftsführers Werner Ingold und der Hausfrau Dorothea Ingold, geb. Maier
- 1967 - 1970 Besuch der Prag-Grundschule in Stuttgart
- 1970 - 1979 Besuch des Wagenburg-Gymnasiums in Stuttgart
Abschluß: Abitur
- 1979 - 1985 Studium der Physik an der Universität Stuttgart
- 1984 - 1985 Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik unter Anleitung von Prof. Dr. H. Grabert
Thema: Beschreibung von Dissipation bei quantenmechanischen Gaussprozessen
- Jan. 1985 Diplom
- Feb. 1985 - Sept. 1985 wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, Beginn der Arbeit an der vorliegenden Dissertation
- Sept. 1985 - Aug. 1986 mit einem Auslandsstipendium an der State University of New York at Stony Brook
- Sept. 1986 - Juli 1988 wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart
- seit Aug. 1988 wissenschaftlicher Angestellter im Fachbereich Physik der Universität-GHS Essen

An dieser Stelle möchte ich ganz besonders Herrn Prof. Hermann Grabert danken, der durch seine ständige Unterstützung und Diskussionsbereitschaft diese Arbeit erst ermöglicht hat.

Auf dem Gebiet der Realzeitbeschreibung dissipativer Systeme hatte ich das Vergnügen einer längeren, fruchtbaren Zusammenarbeit mit Dr. Peter Schramm.

Prof. Sudip Chakravarty danke ich für die Möglichkeit, ein Jahr an der State University of New York at Stony Brook zu verbringen. Er hat, wie auch Prof. Steven Kivelson, durch seine Unterstützung viel zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Bei den Experimentatoren des Minnesota-Experiments Dr. Brad Orr und ganz besonders Dr. Heinrich Jäger, möchte ich mich für Diskussionen und Informationen über ihre Messungen bedanken.

Herr Prof. Dr. H.-R. Trebin hat freundlicherweise den Mitbericht übernommen. Auch ihm danke ich für seine Bemühungen.

Nicht zuletzt sei den Mitarbeitern des zweiten Instituts für Theoretische Physik der Universität Stuttgart sowie des Department of Physics der SUNY Stony Brook gedankt, die die angenehme Atmosphäre schufen, in der diese Arbeit entstand.