

Quantensysteme im Nichtgleichgewicht

TU Berlin, SS 2012

Prof. Dr. T. Brandes

18. Juli 2012

INHALTSVERZEICHNIS

1. Transport als Streuproblem	2
1.1 Das Leitwertquantum	2
1.1.1 Freies Fermigas	2
1.1.2 Ein Gedankenexperiment	3
1.1.3 Landauer-Formel	4
1.2 Die Streumatrix	6
1.2.1 Streutheorie in einer Dimension	7
1.2.2 Streumatrix für quasi-eindimensionale Systeme	12
1.2.3 Leitwert	13
1.2.4 Quantenmechanische Kohärenz	16
1.3 Die Transfermatrix	16
1.4 Gittermodelle	17
1.4.1 Eindimensionale Kette	17
1.4.2 Höherdimensionale Gitter	19
1.4.3 Gittermodelle mit Zufallsgrößen	19
2. Theorie der Linearen Antwort	21
2.1 Die Suszeptibilität	21
2.1.1 Wechselwirkungsbild	21
2.1.2 Suszeptibilität	22
2.1.3 Analytische Eigenschaften von $\tilde{\chi}_{AB}(\omega)$	23
2.2 Das Fluktuations-Dissipations-Theorem	24
2.2.1 Beispiel: harmonischer Oszillator	26
2.2.2 Oszillator mit Ohmscher Dämpfung	27
2.2.3 Energieabsorption	28
2.3 Die Relaxationsfunktion	29
2.3.1 Thermische Suszeptibilität	31
2.3.2 Klassischer Limes für $\Phi_{AB}(t)$	31
2.3.3 Zusammenhang zwischen χ^- und Φ -Funktion	32
2.4 Die Kubo-Formel für die Leitfähigkeit	32
2.4.1 Linear-Response-Ausdruck	33
2.4.2 Homogene Leitfähigkeit	35
2.4.3 Lorentz-Drude-Modell	36
2.4.4 Drude-Modell für die Relaxationfunktion	39

2.4.5	Wechselwirkungsfreie Fermionen	39
2.5	Die Gedächtnis-Funktion	41
2.5.1	Bewegungsgleichungen	41
2.5.2	Gedächtnis-Funktion für Streuung an statischen Potentialen	42
3.	Greensche Funktionen für das Nichtgleichgewicht	44
3.1	Einführung	44
3.1.1	Die Zeitkontur	45
3.1.2	Die vier Greenschen Funktionen	46
3.2	Die Störungsreihe	47
3.2.1	Wicksches Theorem und Diagramme	48
3.2.2	Tunnel-Hamiltonian	50
3.2.3	Freie fermionische GF	52
3.2.4	Die Selbstenergie	53
3.2.5	Beispiel: Ein-Niveau-Modell	53
3.3	Zählstatistik	56
3.3.1	von-Neumann-Messung	56
3.3.2	Tunnel-Modell	58
3.3.3	Verallgemeinerte Greensche Funktionen	58
3.3.4	Kumulantenerzeugende Funktion	60
3.3.5	Gemischte GF	61
3.3.6	Beispiel: ein resonantes Niveau	62
3.4	Levitov-Lesovik-Formel	65
3.4.1	Herleitung aus den verallgemeinerten Greensfunktionen	65
3.4.2	Diskussion	66
4.	Die Mastergleichung	67
4.1	Ableitung der Mastergleichung	67
4.1.1	Reduzierte Dichtematrix	69
4.1.2	Faktorisierung und Bornsche Näherung	70
4.1.3	Zerlegung	70
4.1.4	Direkter Markovscher Limes	71
4.2	Die Mastergleichung für das Einniveausystem	73
4.2.1	Exakter Markov-Limes	74
4.2.2	Ratengleichung in Markov-Näherung	74
4.2.3	Matrixdarstellung	76
4.2.4	Dichtematrix und Zählstatistik	77
4.3	The damped harmonic oscillator	78
4.3.1	Rates and Energy Shift (RWA)	79
4.3.2	Lindblad Form of RWA-Master Equation	81
4.3.3	Expectation Values (RWA Model)	82
4.3.4	Master Equation (Non-RWA Model)	83
4.3.5	Properties of $C(t)$, validity of Markov assumption	84
4.3.6	Derivation of Master equation (non-RWA), secular approximation	85

4.4	Phase Space Solution Methods	86
4.4.1	P -representation	86
4.4.2	Zero temperature	89
4.4.3	Finite temperatures	90
4.4.4	W -representation	91
4.4.5	Remarks	93
4.5	Grobkörnungs-Verfahren	93
4.5.1	Positivität und Lindblad-Form	95
4.5.2	Auswertung	95
4.5.3	Born-Markov-Sekulärnäherung ($\tau \rightarrow \infty$)	97
4.6	Correlation Functions	98
4.6.1	The Quantum Regression Theorem	98
4.6.2	Die Wartezeitenverteilung	101
4.6.3	Die $g^{(2)}(\tau)$ -Funktion	104
5.	Das Fluktuationstheorem	106
5.1	Zeitumkehr	106
5.1.1	Zeitumkehroperator θ	106
5.1.2	Zeitabhängiger Hamiltonian	108
5.1.3	Zweipunktmessungen	109
5.2	Fluktuationstheoreme	110
5.2.1	Fluktuationstheorem der Arbeit	110
5.2.2	Austausch-Fluktuationstheorem	112
5.3	Fluktuationstheorem und Zählstatistik	114
5.3.1	Levitov-Lesovik-Formel	115
5.3.2	Kumulanten von $P(n, t)$	116
5.4	Onsager-Relationen	118
5.4.1	Zwei-Terminal-Messung	118
5.4.2	Gekoppelte Transportprozesse	120
5.4.3	Korrelationsfunktionen	121
5.5	Thermische Transporteffekte	123
5.5.1	Affinität und Fluß	124
5.5.2	Kontinuierliche Beschreibung	124
5.5.3	Linearisierung und Wärmestrom	126
5.5.4	Transportkoeffizienten	127
5.5.5	Isotherme Diffusion	128
5.5.6	Peltier-Effekt (‘Lötstelle’)	128
5.5.7	Seebeck-Effekt (‘Thermoelement’)	129
5.5.8	Thomson-Effekt (‘kontinuierlicher Peltier-Effekt’)	129
6.	Quantenphasenübergänge im Nichtgleichgewicht	131
6.1	Einleitung	131
6.2	Das Quanten-Ising-Modell ($d = 1$) im Gleichgewicht	132
6.2.1	Extreme Grenzfälle	132

6.2.2	Störungstheorie um $J = 0$	133
6.2.3	Störungstheorie um $g = 0$	134
6.2.4	Exakte Lösung	134
6.2.5	Der Quantenphasenübergang	136
6.3	Das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell im Gleichgewicht	136
6.3.1	Klassische Betrachtung	138
6.3.2	Holstein-Primakoff-Transformation	139
6.4	Quantenphasenübergang mit Dissipation	141
6.4.1	Grundsätzliche Fragen	141
6.4.2	Offenes Lipkin-Meshkov-Glick-Modell	142
6.5	Quantentheorie des Lasers	144
6.5.1	Der Mikromaser	145
6.5.2	Der Scully-Lamb-Laser	147
6.5.3	Semiklassische Lasertheorie	148

Geplanter Inhalt:

1. Streuformulierung des elektronischen Transports
 - Nanostrukturen, Leitwertquantisierung, Landauer-Formel (1)
 - Streumatrix, Transfermatrix (1)
 - Herleitung der Landauer-Büttiker-Formel (1)
 - Aharonov-Bohm-Effekt und Interferenz (1)
2. Jenseits des Gleichgewichts
 - Die Theorie der Linearen Antwort: Kubo-Formel. (1)
 - Das Fluktuationstheorem. (2)
 - Keldysh-Greensfunktionen. (2)
 - Zählstatistik, Levitov-Formel (2)
3. Quantenpunkte und Qubits
 - Coulomb-Blockade. (1)
 - Die Mastergleichung (1)
 - Co-Tunneln. Kondo-Effekt (2)
4. Quantenphasenübergänge im Nichtgleichgewicht
 - Lipkin-Modell (1)
 - Dicke-Superradianz-Modell. (1)
 - Laser(-artige) Modelle. (2)

Die Vorlesung kann als Wahlpflichtmodul mit 12 LP eingebracht werden, und zwar entweder ergänzt durch eine zweistündige Spezialvorlesung (Absprache mit dem Dozenten), oder ergänzt durch einen Seminar-Vortrag im ergänzenden Seminar zur VL (Do 14-15, mit kurzer schriftliche Ausarbeitung in Absprache mit dem Dozenten). Folgende Themen werden vergeben (Literatur und Betreuung wird bereitgestellt)

- zu 1. Streutheorie des Transports
 - * Andreev-Streuung.
 - * Unordnungsmittelung und Lokalisierung.
- zu 2. Jenseits des Gleichgewichts
 - * Periodisch getriebene Systeme, Floquet-Theorie.
 - * Die Boltzmann-Gleichung als semiklassischer Zugang.
 - * Aspekte des Fluktuationstheorems.
- zu 4. Quantenphasenübergänge im Nichtgleichgewicht
 - * P-, Q-, W-Darstellungen der Mastergleichung.

T. Brandes, Berlin 2012.

1. TRANSPORT ALS STREUPROBLEM

1.1 Das Leitwertquantum

1.1.1 Freies Fermigas

Wir betrachten ein Fermigas aus freien Fermionen (Elektronen) in d Dimensionen, mit Einteilchen-Ortswellenfunktionen

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{d/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1.1)$$

also ebenen Wellen. Die Teilchen-Dichte ist in zweiter Quantisierung gegeben durch

$$\hat{n}(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{x}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}, \quad (1.2)$$

wobei σ der Spinindex ist (z.B. spin-up/down für Elektronen). Ihr Erwartungswert wird unabhängig vom Ort \mathbf{x} für eine Verteilungsfunktion f , die diagonal im \mathbf{k} -Raum ist, also

$$\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.3)$$

z.B. die Fermiverteilung $f_{\mathbf{k}\sigma} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})$ für das großkanonische Gleichgewicht bei Temperatur T , chemischem Potential μ , und Einteilchenenergie $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$

$$f(\varepsilon) \equiv \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}, \quad \beta \equiv \frac{1}{k_B T}. \quad (1.4)$$

Das ist der Standardfall, für den auch der Erwartungswert der *Teilchen-Stromdichte* j ortsunabhängig wird;

$$\begin{aligned} n &\equiv \langle \hat{n} \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma} \\ \mathbf{j} &\equiv \langle \hat{\mathbf{j}} \rangle = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \end{aligned} \quad (1.5)$$

mit der Masse m der Fermionen. Im Gleichgewicht mit der Fermifunktion $f_{\mathbf{k}\sigma} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ und der quadratischen Dispersionsrelation freier Teilchen

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (1.6)$$

fließt also wegen $f_{\mathbf{k}} = f_{-\mathbf{k}}$ kein Strom, $\mathbf{j} = 0$: In der Summe zählen wir Elektronen in alle \mathbf{k} -Richtungen, und es heben sich entgegengerichtete Beiträge gerade weg.

1.1.2 Ein Gedankenexperiment

Statt in alle Richtungen zu zählen, können wir nun aber auch (zunächst theoretisch) alle Elektronen zählen, die z.B. mit dem \mathbf{k} -Vektor $(k_x > 0, 0, 0)$ genau 'nach rechts' laufen. Die zugehörige Observable hat den Erwartungswert (jetzt in $d = 3$)

$$j_+ \equiv \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta_{k_y,0} \delta_{k_z,0} \theta(k_x) f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{L^3} \sum_{k>0,\sigma} \frac{\hbar k}{m} f(\varepsilon_k). \quad (1.7)$$

Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ geht dieser Ausdruck gegen Null. Wenn wir ihn allerdings mit der Querschnittsfläche L^2 multiplizieren, ergibt sich ein endlicher Strom

$$J_+ \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} L^2 j_+ = \frac{2_s}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{\hbar k}{m} f(\varepsilon_k). \quad (1.8)$$

(Zur Umwandlung von \mathbf{k} -Summen in \mathbf{k} -Integrale vgl. SKRIPT QUANTENMECHANIK I, II oder FESTKÖRPERTHEORIE), wobei wir 2_s als Faktor 2 für die Spinsumme (für Elektronen) bezeichnen. Jetzt substituieren wir

$$\varepsilon_k \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \varepsilon \rightsquigarrow \frac{\hbar^2 k}{m} dk = d\varepsilon, \quad (1.9)$$

und damit erhalten wir

$$J_+ = \frac{2_s}{2\pi\hbar} \int_0^\infty f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2_s}{2\pi\hbar} k_B T \log(1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}}) \quad (1.10)$$

Für sehr kleine Temperaturen $k_B T \ll E_F \equiv \mu(T = 0)$ (E_F ist die Fermi-Energie, SKRIPT THERMODYNAMIK) wird daraus

$$J_+ = \frac{2}{h} E_F. \quad (1.11)$$

Der so definierte Teilchenstrom ist also proportional zur Fermienergie. Wir interpretieren die Fermienergie als chemisches Potential, und für Elektronen mit Ladung $-e < 0$ ist $-e\mu \equiv V$ eine *Spannung* (gegenüber dem chemischen Potential Null). Ebenso ist $-eJ_+ \equiv I_+$ dann ein *Ladungsstrom*, und wir haben

$$I_+ = \frac{2e^2}{h} V. \quad (1.12)$$

Das ist ein überraschendes Ergebnis: Wir finden im dreidimensionalen Fermigas im Gleichgewicht in diesem Gedankenexperiment einen linearen Zusammenhang zwischen Strom und Spannung, $I_+ = GV$, mit einem *Leitwert*

$$G_Q \equiv \frac{2e^2}{h}, \quad \text{Leitwert-Quantum,} \quad (1.13)$$

der nur von den Fundamentalkonstanten e und h abhängt. Der so definierte Strom ist hier allerdings noch eine hypothetische Größe, da er auf der etwas künstlichen Zähl-Definition beruht, die wir zu seiner Herleitung benutzt haben.

Das Leitwert-Quantum G_Q ist eine Folge der Eindimensionalität des Stroms, bei der sich die Einteilchen-Zustandsdichte ν_1 (für positive k) genau gegen die Geschwindigkeit weghebt:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k>0} \frac{\hbar k}{m} f(\varepsilon_k) = \int_0^\infty d\varepsilon \nu_1(\varepsilon) v(\varepsilon) f(\varepsilon), \quad \nu_1(\varepsilon) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k>0} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (1.14)$$

Hierbei ist

$$v(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2}{m}\varepsilon}, \quad \nu_1(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\left| \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} \right|_\varepsilon} = \frac{1}{2\pi \hbar v(\varepsilon)}. \quad (1.15)$$

1.1.3 Landauer-Formel

(NAZAROV/BLANTER, KAWABATA) Wie können wir das Leitwert-Quantum G_Q , Gl. (1.13), jetzt tatsächlich beobachtbar machen? Indem wir den hypothetischen Querschnitt L^2 des Gedankenexperiments zu einem ‘Trichter’ zusammenschnüren, der den Strom dann in einen dünnen Kanal z.B. nach rechts ableitet. Über solch einen Kanal kann man dann z.B. zwei Fermi-Gase miteinander verbinden.

Tatsächlich sind solche Experimente 1988 das erste Mal in künstlichen Halbleiterstrukturen durchgeführt worden¹. Zunächst wird ein *zweidimensionales Elektronengas* (2DEG) hergestellt. Die Einteilchen-WF der Elektronen sind dabei in z -Richtung (‘Wachstumsrichtung’) auf die unterste Mode $\chi(z)$ z.B. eines Kastenpotentials in z -Richtung eingeschränkt. In der x - y -Ebene definiert dann ein Potential $V(x, y)$ eine *laterale Quantenstruktur*.

— Ein nur von y abhängiges Potential definiert dann z.B. die Querschnitts-Form eines Wellenleiters. In einem solchen Fall hat die stationäre Einteilchen-SG Lösungen der Form

$$\langle x, y, z | nk \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \phi_n(y) \chi(z), \quad \varepsilon_n(k) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \text{Bandstruktur.} \quad (1.16)$$

Die E_n und $\phi_n(y)$ hängen dabei von $V(y)$ ab, die konstante ‘confinement’-Energie für die unterste Mode in z -Richtung ist hier schon bei E_n hinzugezählt. Der Teilchen-Strom von Elektronen, die sich in positive Richtung bewegen, ist jetzt

$$J_+ \equiv \frac{1}{L} \sum_{k>0n\sigma} \frac{\hbar k}{m} f(\varepsilon_n(k)). \quad (1.17)$$

Bei Temperatur $T = 0$ läuft die Summe über alle n mit $E_n < E_F$

¹ B. J. van Wees *et al.*, Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988) und D. A. Wharam *et al.*, J. Phys. C **21**, L 209 (1988).

— Wir nehmen an, dass sich die Breite des Wellenleiters von $x = -\infty$ nach $x = 0$ langsam (‘adiabatisch’) schliesst und dann hin zu $x = \infty$ wieder langsam öffnet (SKIZZE). Ein Ansatz zur Lösung der SG ist dann, die Energie E_n in der Bandstruktur des Wellenleiters parametrisch als Potentialfunktion von x aufzufassen und damit eine *quasi-eindimensionale* Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} + E_n(x)\right) \Psi_n(x) = E \Psi_n(x). \quad (1.18)$$

zu definieren. Das wird durch numerische Rechnungen und einige analytische Lösungen recht gut bestätigt.

Wir sind damit bei folgendem Bild angelangt: Es gibt eine diskrete Zahl von *Kanälen* n der lateralen Quantenstruktur mit zugehörigen WF $\Psi_n(x)$. Für jeden Kanal definiert $E_n(x)$ eine Potentialschwelle. Teilchen mit Energien $E \gg E_n(x = 0)$ werden einfach transmittiert, allgemein ist der Teilchen-Strom von Elektronen, die sich in positive Richtung bewegen,

$$J_+ \equiv \frac{1}{L} \sum_{k > 0n\sigma} \frac{\hbar k}{m} T_n(k) f(\varepsilon_n(k)), \quad (1.19)$$

wobei hier jetzt $\varepsilon_n(k) \approx E_n(x = 0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und $T_n(k)$ den Transmissionskoeffizienten des Kanals n beim Wellenvektor k bezeichnet. Im hier von uns betrachteten adiabatischen Fall sind die effektiven Potentiale $E_n(x)$ sehr breit und deshalb für (fast) alle Energien die $T_n(k)$ entweder eins (‘offener Kanal’) oder null (‘geschlossener Kanal’).

Bis hierhin haben wir nur *Gleichgewichts*-Physik gemacht (großkanonisches Ensemble). Um jetzt eine realistische Situation zu beschreiben, untersuchen wir den Strom, wenn die Bereiche für $\pm\infty$ (weit weg von der ‘Streuregion’) durch *unterschiedliche* chemische Potentiale (elektrischer Transport) und/oder unterschiedliche Temperaturen (thermischer Transport) beschrieben werden. Dann sind wir in einer Nichtgleichgewichtssituation, die nicht mehr durch eine einfache Schrödingergleichung beschrieben werden kann. Bis heute ist es nicht gelungen, solch eine Situation wirklich befriedigend theoretisch zu modellieren, aber man kann durch plausible Annahmen und Näherungen sehr gute und interessante Ergebnisse erzielen.

Wir betrachten zunächst den Fall zweier Reservoirs (links und rechts) mit chemischen Potentialen μ_L und μ_R . Das linke Reservoir sendet Elektronen durch offene Kanäle nach rechts, das rechte Reservoir sendet Elektronen nach links. Insgesamt ergibt sich ein Teilchenstrom

$$\begin{aligned} J &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k > 0, n_{\text{offen}, \sigma}} \frac{\hbar k}{m} [f_L(\varepsilon_n(k)) - f_R(\varepsilon_n(k))] = \frac{1}{2\pi} \sum_{n_{\text{offen}, \sigma}} \int_{E_n}^{\infty} d\varepsilon \nu_1(\varepsilon) v(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)] \\ &= \frac{2s}{2\pi\hbar} N_{\text{offen}} (\mu_L - \mu_R), \quad k_B T \ll \mu_L, \mu_R. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Das ist wieder ein sehr bemerkenswertes Ergebnis: Wenn wir die Spannung $V = -e(\mu_L - \mu_R)$ als Differenz der chemischen Potential und den Ladungsstrom $I \equiv -eJ$ einführen, erhalten wir

$$I = N_{\text{offen}} G_Q V, \quad G_Q \equiv \frac{2e^2}{h}, \quad \text{Landauer-Formel (Spezialfall)} . \quad (1.21)$$

Die Anzahl N_{offen} der offenen Kanäle kann durch die Breite des ‘Trichters’ eingestellt werden. In Experimenten hat man keinen Trichter, sondern einen sogenannten *Quantenpunktkontakt* (QPC) benutzt (SKIZZE). Wir stellen die transversalen (stehenden) Wellenfunktionen $\phi_n(y)$ z.B. als Wellenfunktionen eines quadratischen Potentials (harmonischer Oszillator) vor. $\phi_0(y)$ ist um $x = 0$ zentriert, mit steigendem Kanalindex n wandert ein beträchtlicher Teil der Wellenfunktion nach aussen und passte dann irgendwann nicht mehr durch die Einschnürung des Quantenpunktkontakts: das entspricht einer Reflektion eines einlaufenden Teilchens, und der entsprechende Kanal ist geschlossen und nicht mehr offen. Wird N_{offen} jetzt kontinuierlich variiert, so ergibt sich ein *stufenförmiger Strom*.

Überraschend ist die gute Übereinstimmung der gemessenen Leitwerte auch für einen QPC, der gar keine Ähnlichkeit mehr mit einem engen Kanal hat und wo eigentlich von transversalen Wellenfunktionen nicht mehr gesprochen werden kann. Quantitative Berechnungen bestätigen aber die gute Quantisierung auch für relativ ‘offene’ QPCs.² Wichtig aber ist, dass die ‘Quantisierung’ des Leitwerts G in

$$I = GV, \quad \text{Definition des Leitwerts } G \quad (1.22)$$

in ganzzahligen Einheiten von G_Q für den QPC (z.B. im Gegensatz zum Quanten-Halleffekt) nicht exakt ist, denn die Kanäle haben niemals genau Transmission eins.

Die Beobachtung dieser *Leitwertquantisierung* war dennoch ein grosser Erfolg, der den Aufstieg des (damals) neuen Gebiets der *mesoskopischen Physik* entscheidend beschleunigte.

1.2 Die Streumatrix

In der obigen Herleitung haben wir nur von offenen und geschlossenen Kanälen gesprochen und die quantenmechanischen Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten durch 0 bzw. 1 approximiert. Der nächste Schritt ist also die Formulierung des Transports von Elektronen durch eine Quantenstruktur als *Streuproblem*. Hierzu wird folgendes angenommen:

- die Elektronen wechselwirken nicht untereinander.
- die Elektronen unterliegen nur einem statischen Potential V und keinen weiteren Einflüssen wie z.B. Phononen.
- der Transport kann als kohärente Streuung von Elektronen zwischen Ein- und Ausgängen der Quantenstruktur beschrieben werden. Die Ein- und Ausgänge werden als Wellenleiter modelliert, die ihrerseits wieder an makroskopische Elektronen-Reservoirs angeschlossen sind, die als Fermi-Gase im Gleichgewicht beschrieben werden.

² vgl. z.B. A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jap. **58**, 372 (1989). Hier wird für einen hyperbelförmigen QPC die Schrödingergleichung in elliptischen Koordinaten exakt gelöst.

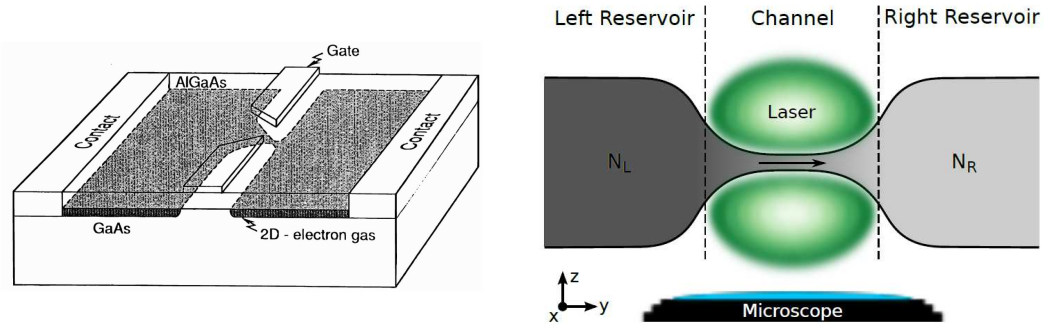


Fig. 1.1: Links: Quantenpunktkontakt (schematisch), wie er in den ersten Experimenten zur Leitwertquantisierung in elektronischen Systemen verwendet wurde (aus: H. v. Houten, C. Beenakker, cond-mat/0512609 (2005)). Rechts: Aktuelles Transportexperiment mit einem Gas aus kalten ${}^6\text{Li}$ -Atomen (aus: J.-P. Brantut, J. Meineke, D. Stadler, S. Krinner, und T. Esslinger, arXiv:1203.1927 (2012)).

Das so entstehende Modell (Reservoir – Zuleitungen – Quantenstruktur) ist eines der Standard-Modelle für den quantenmechanischen Transport. Die Abwesenheit von Wechselwirkungen mit anderen dynamischen Freiheitsgraden (Phononen, Kern-Spins, Photonen etc.) ist eine Idealisierung. Sie wird häufig durch die Abschätzung

$$L \lesssim l_\varphi \quad (1.23)$$

zum Ausdruck gebracht. Hierbei ist L eine typische Dimension der Quantenstruktur (und evtl. eines Teils der Zuleitungen), in dem der Transport *kohärent* erfolgen soll. Die quantenmechanische Kohärenz wird erst auf der Längenskala l_φ (*Phasen-Kohärenzlänge*) gebrochen. Letztere ist abhängig von der Art der inelastischen Wechselwirkungen und Parametern wie z.B. der Temperatur. Typischerweise wächst l_φ mit sinkender Temperatur an. Für quantenmechanisch kohärenten Transport, insbesondere zur Beobachtung vieler Interferenzphänomene, werden also sehr niedrige Temperaturen benötigt, die typischerweise im Bereich weniger Kelvin oder im Milli-Kelvinbereich liegen.

Zum so entwickelten Bild des Transports passt eine Modellierung im Rahmen der quantenmechanischen Streutheorie (vgl. QUANTENMECHANIK II). Im Prinzip könnte man jetzt versuchen, die Streuzustände des Potentials $V(x, y)$ explizit zu bestimmen und z.B. deren Beiträge zum Stromdichte-Operator bestimmen. Eine elegantere und in vielen Fällen wesentlich zweckmässigerer Beschreibung basiert auf der *Streumatrix*. Wir zeigen, dass der Leitwert durch eine Struktur sich letztlich allein durch Transmissionskoeffizienten ausdrücken lässt.

1.2.1 Streutheorie in einer Dimension

Wir wiederholen hier zunächst Streutheorie in einer Dimension (vgl. QUANTENMECHANIK II).

1.2.1.1 Zur Normierung ebener Wellen

In der ‘Kastennormierung’ haben wir

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}, \quad \text{Normierung auf Kasten der Länge } L. \quad (1.24)$$

Das ist für $k > 0$ eine von *links* und für $k < 0$ eine von *rechts* einlaufende ebene Welle, wie man an der Zeitabhängigkeit

$$\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}e^{-iE_k t}, \quad E_k > 0 \quad (1.25)$$

sieht: für konstante Phase $\phi(x, t) \equiv kx - E_k t$ gilt

$$\dot{x} = E_k/k, \quad (1.26)$$

d.h. das Vorzeichen der Phasengeschwindigkeit ist gleich dem Vorzeichen von k .

Bei endlicher Länge L ist hier sowohl bei periodischen als auch bei festen Randbedingungen k diskret, was für die Streutheorie etwas ungünstig ist. Alternativ gibt es deshalb eine ‘Geschwindigkeitsnormierung’

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}}e^{ikx}, \quad v \equiv \frac{|k|}{m} \quad (1.27)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle k|k'\rangle = \frac{m}{\sqrt{2\pi|k|}} \frac{1}{\sqrt{2\pi|k'|}} \int dx e^{-i(k-k')x} = \frac{m}{|k|} \delta(k - k') \quad (1.28)$$

Für eine feste Energie $E = k^2/2m$ gibt es dementsprechend zwei mögliche Werte von k und entsprechend Wellenfunktionen (MELLO/KUMAR) mit Energienormierung

$$\langle x|\phi_s(E)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}}e^{iskx}, \quad s = \pm 1, \quad \langle \phi_s(E)|\phi_{s'}(E')\rangle = \delta_{ss'}\delta(E - E') \quad (1.29)$$

(NACHRECHNEN).

1.2.1.2 Streuzustände

Für ein beliebiges Potential $V(x)$ folgen die Streuzustände $\Psi_s^\pm(E, x)$ in $d = 1$ Dimension aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\Psi_s^\pm(E, x) = \phi_s(E, x) + \int dx' G_0^\pm(x, x'; E)V(x)\Psi_s^\pm(E, x') \quad (1.30)$$

mit der freien Greenschen Funktion $G_0^\pm(x, x'; E)$ (QMII)

$$G_0^\pm(x, x'; E) = \pm \frac{m}{i|k|} e^{\pm i|k||x-x'|}, \quad E = k^2/2m > 0, \quad d = 1 \text{ Dimension.} \quad (1.31)$$

AUFGABE: Hängt $G_0^\pm(x, x'; E)$ von der Normierung der ebenen Wellen ab?

Statt der Kugelwellen in $d = 3$ Dimensionen haben wir jetzt also ebene Wellen, und für $x \rightarrow \pm\infty$ gilt

$$\begin{aligned} |x - x'| &= \sqrt{(x - x')^2} = |x| \sqrt{(1 - x'/x)^2} = |x| - x' \operatorname{sgn}(x) + O(x'^2/x^2) \\ &= \operatorname{sgn}(x) (x - x') + O(x'^2/x^2) \end{aligned} \quad (1.32)$$

woraus wir folgende Asymptotik erhalten (Energienormierung)

$$\begin{aligned} \Psi_s^+(E, x) &= \phi_s(E, x) \\ &- i \frac{m}{|k|} e^{i|k|\operatorname{sgn}(x)x} \int dx' e^{-i|k|\operatorname{sgn}(x)x'} V(x') \Psi_s^+(E, x'), \quad |x| \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Für $x \rightarrow \pm\infty$ erhalten wir daraus den Transmissionskoeffizienten t und den Reflexionskoeffizienten r für eine von links einfallende Welle ($s = 1$) und den Transmissionskoeffizienten t' und den Reflexionskoeffizienten r' für eine von rechts einfallende Welle ($s = -1$);

$$\begin{aligned} \Psi_+^+(E, x) &\equiv t\phi_+(E, x) \\ &= \phi_+(E, x) \left[1 - 2\pi i \int dx' \phi_+^*(E, x') V(x') \Psi_+^+(E, x') \right], \quad x \rightarrow \infty \\ \Psi_+^+(E, x) &= \phi_+(E, x) + r\phi_-(E, x) \\ &= \phi_+(E, x) + \phi_-(E, x) (-2\pi i) \int dx' \phi_-^*(E, x') V(x') \Psi_+^+(E, x'), \quad x \rightarrow -\infty \\ \Psi_-^+(E, x) &\equiv t'\phi_-(E, x) \\ &= \phi_-(E, x) \left[1 - 2\pi i \int dx' \phi_-^*(E, x') V(x') \Psi_-^+(E, x') \right], \quad x \rightarrow -\infty \\ \Psi_-^+(E, x) &= \phi_-(E, x) + r\phi_+(E, x) \\ &= \phi_-(E, x) + \phi_+(E, x) (-2\pi i) \int dx' \phi_+^*(E, x') V(x') \Psi_-^+(E, x'), \quad x \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (1.34)$$

also insgesamt

$$\begin{aligned} t &= 1 - 2\pi i \langle \phi_+(E) | V | \Psi_+^+(E) \rangle, \quad r = -2\pi i \langle \phi_-(E) | V | \Psi_+^+(E) \rangle \\ t' &= 1 - 2\pi i \langle \phi_-(E) | V | \Psi_-^+(E) \rangle, \quad r' = -2\pi i \langle \phi_+(E) | V | \Psi_-^+(E) \rangle. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Schließlich kann man die Energie-normierten Zustände auch so schreiben, dass nur $k \equiv |k| > 0$ auftritt, muss dann aber die zwei Möglichkeiten $\pm k$ unterscheiden, was auf

$$t = 1 - 2\pi i \langle \phi_k | V | \Psi_k^+ \rangle, \quad r = -2\pi i \langle \phi_{-k} | V | \Psi_k^+ \rangle, \quad k = \sqrt{2mE} > 0 \quad (1.36)$$

$$t' = 1 - 2\pi i \langle \phi_{-k} | V | \Psi_{-k}^+ \rangle, \quad r' = -2\pi i \langle \phi_k | V | \Psi_{-k}^+ \rangle \quad (1.37)$$

führt, was vielleicht die übersichtlichste Schreibweise ist. Die Streuzustände sind dann in dieser Schreibweise ($k > 0$)

$$\Psi_k^+(x) = t\phi_k(x), \quad x \rightarrow \infty \quad (1.38)$$

$$= \phi_k(x) + r\phi_{-k}(x), \quad x \rightarrow -\infty \quad (1.39)$$

$$\Psi_{-k}^+(x) = \phi_{-k}(x) + r'\phi_k(x), \quad x \rightarrow \infty \quad (1.40)$$

$$= t'\phi_{-k}(x), \quad x \rightarrow -\infty \quad (1.41)$$

Für eine feste Energie E hat eine beliebige Lösung der stationären Schrödingergleichung die Form

$$\Psi(x, t) = a_1 \Psi_k^+(x) + a_2 \Psi_{-k}^+(x), \quad (1.42)$$

wobei die Koeffizienten a_1, a_2 für $|x| \rightarrow \infty$ den *einlaufenden* (auf das Potential zulaufenden) Anteil beschreiben. Andererseits können wir $\Psi(x, t)$ zerlegen als

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= a_1 t \phi_k(x) + a_2 [\phi_{-k}(x) + r' \phi_k(x)], \quad x \rightarrow \infty \\ &= a_2 \phi_{-k}(x) + b_2 \phi_k(x), \quad b_2 \equiv a_1 t + a_2 r' \end{aligned} \quad (1.43)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= a_1 [\phi_k(x) + r \phi_{-k}(x)] + a_2 t' \phi_{-k}(x), \quad x \rightarrow -\infty \\ &= a_1 \phi_k(x) + b_1 \phi_{-k}(x), \quad b_1 \equiv a_1 r + a_2 t', \end{aligned} \quad (1.44)$$

wobei die Koeffizienten b_1, b_2 für $|x| \rightarrow \infty$ den *auslaufenden* (vom Potential weglaufernden) Anteil beschreiben. Es besteht also der lineare Zusammenhang

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad S \equiv \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad \text{Streumatrix.} \quad (1.45)$$

1.2.1.3 Die S -Matrix in einer Dimension

Unsere allgemeine Beziehung (QMII)

$$\langle m | \tilde{U}(\infty, -\infty) | n \rangle = \langle m | n \rangle - 2\pi i \delta(E_n - E_m) \langle m | T^+(E_n) | n \rangle, \quad (1.46)$$

schreiben wir jetzt in der Notation unserer eindimensionalen Streuzustände. Die Kets $|n\rangle$ entsprechen dabei den $|\phi_{\pm k}\rangle$, die ja auf die Energie normiert waren,

$$\langle \phi_{sk} | \phi_{s'k'} \rangle = \delta_{ss'} \frac{m}{2\pi k} \int dx e^{i(s'k' - sk)x} = \delta_{ss'} \frac{m}{k} \delta(k - k') = \delta_{ss'} \delta(E_k - E_{k'}). \quad (1.47)$$

Wir haben dann also

$$\langle \phi_{sk} | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \phi_{s'k'} \rangle = [\delta_{ss'} - 2\pi i \langle \phi_{sk} | T^+(E_k) | \phi_{s'k'} \rangle] \delta(E_k - E_{k'}) \quad (1.48)$$

Aus dem Matrixelement $\langle \phi_{sk} | \tilde{U}(\infty, -\infty) | \phi_{s'k'} \rangle$ ist jetzt die Energieerhaltungs-Deltafunktion ganz ausgeklammert. Als eigentliche Streumatrix definiert man dann den übrigen Anteil, mit dem Vorteil, dass man keine Distributionswertigen Anteile herumschleppen muss;

$$S_{ss'} = \delta_{ss'} - 2\pi i \langle \phi_{sk} | T^+(E_k) | \phi_{s'k} \rangle \quad (1.49)$$

Hierbei ist die Energie E_k und damit auch $k = k'$ fixiert, die einzigen Freiheitsgrade sind die \pm -Indizes s, s' . Die S -Matrix ist damit eine 2×2 -Matrix.

Wir benutzen nun den Zusammenhang

$$\langle \phi_{sk} | V | \Psi_{s'k}^+ \rangle = \langle \phi_{sk} | T^+(E_k) | \phi_{s'k} \rangle \quad (1.50)$$

für die Elemente der T -Matrix zusammen mit Gl. (1.36);

$$\begin{aligned} t &= 1 - 2\pi i \langle \phi_k | T^+(E_k) | \phi_k \rangle = S_{++}, & r &= -2\pi i \langle \phi_{-k} | T^+(E_k) | \phi_k \rangle = S_{-+} \\ t' &= 1 - 2\pi i \langle \phi_{-k} | T^+(E_k) | \phi_{-k} \rangle = S_{--}, & r' &= -2\pi i \langle \phi_k | T^+(E_k) | \phi_{-k} \rangle = S_{+-}. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Damit ist auch die Interpretation klar: wir schreiben Gl. (1.61) als

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{-+} & S_{--} \\ S_{++} & S_{+-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (1.52)$$

Die S -Matrix bildet also die einlaufenden Komponenten a_1, a_2 auf die auslaufenden Komponenten b_1, b_2 linear ab. Ein letzter Punkt ist nun die Unitarität von S , die wegen der Delta-Funktion in Gl. (1.48) nicht so offensichtlich erscheint. Allerdings besagt die rechte Seite von Gl. (1.48) nicht anderes als eine 'Blockdiagonalität' von $\tilde{U}(\infty, -\infty)$ im Raum der Zustände $|\phi_{s'k'}\rangle$ (MELLO/KUMAR). Die einzelnen Blöcke, d.h. die Matrizen S , müssen dann unitär sein, es gilt also

$$S^\dagger S = 1 \rightsquigarrow \begin{pmatrix} r^* & t^* \\ (t')^* & (r')^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = 1, \quad (1.53)$$

insbesondere also die aus QM I bekannte Beziehung zwischen Transmissions- und Reflexions-Wahrscheinlichkeiten

$$|t|^2 + |r|^2 = |t'|^2 + |r'|^2 = 1. \quad (1.54)$$

Physikalisch bedeutet die Unitarität der S -Matrix also Wahrscheinlichkeitserhaltung, oder im Bild streuender Elektronen die Erhaltung der Teilchenstromdichte.

AUFGABE: Zeige, dass die Streumatrix für $H = p^2/2m + V(x)$ in einer Dimension nicht nur unitär, sondern auch symmetrisch ist;

$$S = S^T = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (1.55)$$

Hinweis: Benutze die asymptotische Form der Streuzustände und die Zeitumkehrinvarianz der Schrödingergleichung für diesen Hamiltonian.

Daraus folgt, dass der Transmissionskoeffizient zu einer festen Energie unabhängig von der Einfallsrichtung ist.

AUFGABE: Zeige, dass die S -Matrix für eine Potentialstufe $V(x) = V\theta(x)$, $V > 0$, für Energien $0 < E < V$ ein Skalar mit Betrag eins ist. Berechne S und diskutiere den zugehörigen Streuzustand.

DISKUSSION: Welche physikalische Bedeutung haben die Eigenwerte und die Eigenvektoren der Streumatrix S ?

1.2.2 Streumatrix für quasi-eindimensionale Systeme

(NAZAROV/BLANTER, BRUUS/FLENSBERG) Wir betrachten jetzt eine laterale Quantenstruktur in der x - y -Ebene, die über ideale Wellenleiter ('Zuleitungen' mit Index α) an die Aussenwelt (Reservoir) gekoppelt ist (SKIZZE). Im einfachsten Fall haben wir zwei Zuleitungen $\alpha = L, R$ (links/rechts) in x -Richtung, die durch Hamiltonians \mathcal{H}_α mit stationären Lösungen

$$\mathcal{H}_\alpha |\phi_s(\alpha n E)\rangle = E |\phi_s(\alpha n E)\rangle \quad (1.56)$$

beschrieben werden. Hierbei ist die Energie E kontinuierlich, aber für die Wellenfunktionen in den Zuleitungen gilt

$$\langle xy | \phi_s(\alpha n E)\rangle = \chi_{\alpha n}(y) \frac{1}{\sqrt{2\pi v_{\alpha n}}} e^{i s k_{\alpha n} x}, \quad s = \pm 1, \quad k_{\alpha n} = \sqrt{2m(E - \varepsilon_{\alpha n})}, \quad (1.57)$$

wobei die ε_n die diskreten Eigenwerte zu den orthogonalen, transversalen Moden $\chi_{\alpha n}(y)$ sind,

$$\mathcal{H}_\alpha \chi_{\alpha n}(y) = \varepsilon_{\alpha n} \chi_{\alpha n}(y), \quad \langle \chi_{\alpha n} | \chi_{\alpha' n'}\rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{nn'}. \quad (1.58)$$

Der Anteil $\frac{1}{\sqrt{2\pi v_{\alpha n}}} e^{i s k_{\alpha n} x}$ entspricht wie beim eindimensionalen Streuen einer ebenen Welle in x -Richtung, $v_{\alpha n} = \hbar k_{\alpha n} / m$ ist die Geschwindigkeit.

Für eine Wellenfunktionen des Gesamtsystems (Quantenstruktur + Zuleitungen) zur Energie E gelten die Einwicklungen nach den vollständigen Systemen im linken bzw. rechten Wellenleiter in Analogie zum eindimensionalen Fall (dort entspricht $L=1, R=2$, vgl. Gl. (1.61))

$$|\Psi\rangle = \sum_n [a_{Ln} |\phi_+(LnE)\rangle + b_{Ln} |\phi_-(LnE)\rangle], \quad \text{Entwicklung links} \quad (1.59)$$

$$= \sum_n [a_{Rn} |\phi_-(RnE)\rangle + b_{Rn} |\phi_+(LnE)\rangle], \quad \text{Entwicklung rechts} \quad (1.60)$$

Hierbei sind die $a_{\alpha n}$ die Koeffizienten für die *einlaufenden Wellen* und $b_{\alpha n}$ die Koeffizienten für die *auslaufenden Wellen* im Leiter α und Kanal n . Die Verallgemeinerung der 2×2 -Streumatrix in Gl. (1.61) ist also eine im Prinzip unendlichdimensionale Matrix mit Tensorstruktur;

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_L \\ \mathbf{b}_R \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix}, \quad S \equiv \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad \text{Streumatrix.} \quad (1.61)$$

Tatsächlich sind für feste Energie E aber nur die Kanäle relevant, für die der Wellenvektor $k_{\alpha n} = \sqrt{2m(E - \varepsilon_{\alpha n})}$ auch tatsächlich reell ist und die zugehörige Wellenfunktion propagierende Elektronen beschreibt. Wenn es N_L bzw. N_R solcher *offenen Kanäle* gibt, ist die Streumatrix S von der Dimension $(N_L + N_R) \times (N_L + N_R)$.

Wie in einer Dimension muss die Streumatrix wieder unitär sein. Es gilt Wahrscheinlichkeitserhaltung für den ein- und ausfallenden Fluss der Elektronen,

$$(\mathbf{b}_L^\dagger, \mathbf{b}_R^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{b}_L \\ \mathbf{b}_R \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_L^\dagger, \mathbf{a}_R^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix} \rightsquigarrow S = (S^\dagger)^{-1}. \quad (1.62)$$

1.2.3 Leitwert

Wir berechnen jetzt den Teilchenstrom zwischen zwei Reservoiren L und R , die über Wellenleiter an die Quantenstruktur angeschlossen sind. Die Herleitung ist hier zunächst heuristisch und wird dann später verfeinert.

Der Strom ist wegen der Kontinuitätsgleichung erhalten und kann an einem beliebigen Querschnitt eines Wellenleiters berechnet werden. Wir wählen ihn im linken Wellenleiter L weit weg von der eigentlichen Quantenstruktur. Elektronen mit Wellenvektor $k_n > 0$ fließen nach rechts, und zwar mit Teilchenstromdichte

$$\begin{aligned} J_+ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k_{Ln}, n\sigma} \frac{\hbar k_{Ln}}{m} f_L \left(\frac{\hbar^2 k_{Ln}^2}{2m} + \varepsilon_{Ln} \right) \\ &= \frac{2s}{2\pi} \sum_n \int_0^\infty dk \frac{\hbar k}{m} f_L \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_{Ln} \right). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Elektronen mit Wellenvektor $k_n < 0$ sind entweder reflektierte Elektronen, die ursprünglich von links kamen (Besetzung mit f_L), oder transmittierte von rechts (Besetzung mit f_R) und führen zu einem Strom nach links

$$\begin{aligned} J_- &= \frac{2s}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^0 dk \frac{\hbar k}{m} R_n(E) f_L(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_{Ln}} \\ &+ \frac{2s}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^0 dk \frac{\hbar k}{m} T'_n(E) f_R(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_{Rn}} \end{aligned} \quad (1.64)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} R_n &\equiv \sum_m |r_{nm}|^2 = (rr^\dagger)_{nn}, \quad \text{Summe Reflektionen } m \rightarrow n \text{ auf linker Seite} \\ T'_n &\equiv \sum_m |t'_{nm}|^2 = (t't'^\dagger)_{nn}, \quad \text{Summe Transmissionen von } m \text{ rechts nach } n \text{ links.} \end{aligned} \quad (1.65)$$

Aus der Unitarität $SS^\dagger = \hat{1}$ folgt

$$rr^\dagger + t't'^\dagger = \hat{1} \rightsquigarrow \sum_m (|r_{nm}|^2 + |t'_{nm}|^2) = 1 \rightsquigarrow R_n + T'_n = 1 \quad (1.66)$$

wobei $\hat{1}$ jeweils eine entsprechend dimensionierte diagonale Einheitsmatrix ist.

Weiterhin bei *Zeitumkehrinvarianz* (die wir in dieser einfachen Herleitung hier voraussetzen)

$$t' = t^T \rightsquigarrow T'_n \equiv \sum_m t'^*_{nm} t'_{nm} = \sum_m t^*_{mn} t_{mn} = \sum_m t^\dagger_{nm} t_{mn} = (t^\dagger t)_{nn} = T_n \quad (1.67)$$

Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned} J &\equiv J_+ - J_- = \frac{2s}{2\pi} \sum_n \int_0^\infty dk \frac{\hbar k}{m} \left(T_n(E) f_L(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_{Ln}} - T_n(E) f_R(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_{Rn}} \right) \\ &= \frac{2s}{2\pi\hbar} \sum_n \left(\int_{\varepsilon_{Ln}}^\infty dE T_n(E) f_L(E) - \int_{\varepsilon_{Rn}}^\infty dE T_n(E) f_R(E) \right). \end{aligned} \quad (1.68)$$

Nun ist

$$T_n(E < \varepsilon_{Ln}) = T_n(E < \varepsilon_{Rn}) = 0, \quad (1.69)$$

denn es kann für Energien unterhalb einer der ‘Bandkanten’ $\varepsilon_{L/Rn}$ im linken und rechten Wellenleiter nichts durch den entsprechenden Kanal transmittiert werden, da für solchen Energien die k -Vektoren nicht reell sind. Also kann das Energieintegral bis Null ausgedehnt werden,

$$J = \frac{2s}{2\pi\hbar} \sum_n \int_0^\infty dE T_n(E) (f_L(E) - f_R(E)). \quad (1.70)$$

Wir schreiben das wieder mit Hilfe der Transmissionsmatrix t ,

$$J = \frac{2s}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dE \text{Tr}(t^\dagger t)(E) (f_L(E) - f_R(E)), \quad (1.71)$$

denn für die Spur gilt ja

$$\text{Tr} t^\dagger t = \sum_n (t^\dagger t)_{nn} = \sum_n T_n. \quad (1.72)$$

Jetzt betrachten wir *linearen Transport*, d.h. den Grenzfall einer verschwindenden Differenz der chemischen Potentiale

$$\mu \equiv \mu_R, \quad \mu_L - \mu_R \equiv \delta\mu \rightarrow 0 \quad (1.73)$$

Dann entwickeln wir

$$f_L(E) - f_R(E) = f(E + \mu_R - \mu_L) - f(E) = -\delta\mu f'(E). \quad (1.74)$$

Für Temperaturen $k_B T \ll \mu$ gilt dann

$$-f'(E) = \delta(E - \mu) + O\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2. \quad (1.75)$$

Mit der Einführung der Elementarladung $-e$ und der Ladungsstromdichte $I \equiv -eJ$ sowie der Spannung $V \equiv -e\delta\mu$ erhalten wir dann die lineare Beziehung

$$I = \frac{2_s e^2}{2\pi\hbar} \text{Tr}(t^\dagger t)(\mu) V \quad (1.76)$$

und damit den Leitwert

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(t^\dagger t)(\mu), \quad k_B T \ll \mu, \quad \text{Landauer-Büttiker-Formel.} \quad (1.77)$$

Der Leitwert ist also bei tiefen Temperaturen nur durch das Leitwertquantum und durch die *Transmissionseigenschaften* der Nanostruktur bestimmt, die durch die Transmissionsmatrix t an der Stelle des chemischen Potentials (Fermi-Energie) bestimmt werden. Zur Bestimmung von t muss allerdings das quantenmechanische Streuproblem für die betreffende Nanostruktur gelöst werden, was i.A. sehr schwierig ist.

Spezialfälle der Landauer-Büttiker-Formel:

- Nur ein Transportkanal ist bei der betrachteten Fermi-Energie offen. Dann ist $\text{Tr}(t^\dagger t)(\mu) = T(\mu)$ der Transmissionskoeffizient dieses Kanals, und wir haben

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\mu) \quad (1.78)$$

- Ballistischer Transport: die Transmissionsmatrix ist diagonal und in guter Näherung gegeben durch Einträge $t_{nn}(E) = \theta(E - \varepsilon_n)$, d.h. Stufenfunktionen mit der unteren Bandkante ε_n des n -ten Kanals. So eine Situation kann z.B. angenähert in idealen *Quantendrähten* vorliegen, die dann wie Wellenleiter funktionieren. Dann ist

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n \theta(\mu - \varepsilon_n), \quad (1.79)$$

und als Funktion der Fermienergie μ erhalten wir *Leitwertstufen* (SKIZZE).

1.2.4 Quantenmechanische Kohärenz

Der quantenmechanische Leitwert G wird durch die Transmissionsmatrix bestimmt, also durch Eigenschaften der Schrödingergleichung für ein gegebenes Streupotential. Es ist klar, dass wir z.B. beim Aneinanderfügen zweier Nanostrukturen den Leitwert der gesamten Struktur nicht einfach aus den Leitwerten der einzelnen Strukturen bestimmen können. Zum Beispiel können in der so entstandenen neuen Struktur quantenmechanische Interferenzen oder Resonanzen auftreten (Beispiel: Fabry-Perot-Interferometer). Die Transmissionsmatrix und damit der Leitwert muss im Prinzip für eine neue Struktur jedesmal wieder neu ausgerechnet werden.

Das ist anders im klassischen elektrischem Transport. Zum Beispiel ist der Widerstand R einer Serienschaltung zweier Widerstände R_1 und R_2 durch deren Summe gegeben. Für den Leitwert gilt dann in diesem Fall

$$G \equiv \frac{1}{R} = \frac{1}{R_1 + R_2} = \frac{1}{\frac{1}{G_1} + \frac{1}{G_2}} = \frac{G_1 G_2}{G_1 + G_2}, \quad \text{klassisch.} \quad (1.80)$$

Eine wichtige Frage in der Transporttheorie ist es, den Übergang vom quantenmechanischen, mikroskopischen Transportverhalten zu den makroskopischen Materialeigenschaften wie z.B. dem Ohmschen Gesetz zu erklären. Das kann durch Modelle bewerkstelligt werden, die das Brechen der quantenmechanischen Kohärenz z.B. durch Wechselwirkungen mit inelastischen Freiheitsgraden wie Phononen beschreiben.

1.3 Die Transfermatrix

Zunächst bleiben wir jedoch beim quantenmechanisch kohärentem Transport wechselwirkungsfreier Elektronen.

(NAZAROV/BLANTER) Für den Transport durch 'hintereinandergeschaltete' Systeme bietet sich die aus QM I bekannte *Transfermatrix* M an, die Koeffizienten links vom Streubereich mit denen rechts vom Streubereich verbindet (wir betrachten wieder eine quasi-eindimensionale Geometrie). Wir vergleichen mit der Definition der Streumatrix S ,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_L \\ \mathbf{b}_R \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix}, \quad S \equiv \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad \text{Streumatrix} \quad (1.81)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_R \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_L \end{pmatrix}, \quad M \equiv \begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_3 \end{pmatrix}, \quad \text{Transfermatrix.} \quad (1.82)$$

Beachte die Reihenfolge $\begin{pmatrix} \mathbf{b}_R \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix}$ in der Gleichung für M : die nach rechts laufenden Komponenten stehen oben. Wir vergleichen auch die Formulierung der Wahrscheinlich-

keitserhaltung für den ein- und ausfallenden Fluss der Elektronen, Gl. (1.62),

$$\begin{aligned} (\mathbf{b}_L^\dagger, \mathbf{b}_R^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{b}_L \\ \mathbf{b}_R \end{pmatrix} &= (\mathbf{a}_L^\dagger, \mathbf{a}_R^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix} \rightsquigarrow S = (S^\dagger)^{-1} \\ \Leftrightarrow (\mathbf{b}_R^\dagger, \mathbf{a}_R^\dagger) \sigma_z \begin{pmatrix} \mathbf{b}_R \\ \mathbf{a}_R \end{pmatrix} &= (\mathbf{a}_L^\dagger, \mathbf{b}_L^\dagger) \sigma_z \begin{pmatrix} \mathbf{a}_L \\ \mathbf{b}_L \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.83)$$

mit der Block-Paulimatrix σ_z . Durch Vergleich mit der Definition von M , Gl. (1.81), haben wir

$$M^\dagger \sigma_z M = \sigma_z. \quad (1.84)$$

Solche Matrizen nennt man *pseudo-unitär*. Die Streumatrix ist also unitär, die Transfermatrix ist pseudo-unitär (MELLO/KUMAR).

Der grosse Vorteil der Transfermatrix ist ihre Produkteigenschaft: die Transfermatrix für Streuung durch ‘hintereinandergeschaltete’ Systeme ist einfach durch das Produkt der einzelnen Transfermatrizen gegeben (vgl. QM 1).

Weiterhin können wir den Zusammenhang zur Streumatrix herstellen (JANSSEN/VIEHWEGER/FASTENRATH/HAJDU);

$$M = \begin{pmatrix} (t^\dagger)^{-1} & r't'^{-1} \\ -t'^{-1}r & t'^{-1} \end{pmatrix} \quad (1.85)$$

(NACHRECHNEN). Damit lässt sich die Landauer-Büttiker-Formel umschreiben in (AUFGABE)

$$G = G_Q \text{Tr} \frac{2}{MM^\dagger + (MM^\dagger)^{-1} + 2}. \quad (1.86)$$

1.4 Gittermodelle

Die einfachsten Gittermodelle haben in erster Quantisierung in einer ‘Wannier’-Basis von Zuständen $|i\rangle$ die Form

$$\mathcal{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{ij} V_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad V_{ij} = V_{ji}^*, \quad (1.87)$$

die zunächst harmlos aussieht. Die Matrixelemente V_{ij} koppeln die einzelnen Gitterplätze.

1.4.1 Eindimensionale Kette

Hier haben wir

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i=1}^N (V_i |i\rangle \langle i+1| + V_i^* |i+1\rangle \langle i|) \quad (1.88)$$

Für endliches N muss man sich für bestimmte Randbedingungen entscheiden, z.B. periodische mit $|N+1\rangle = |1\rangle$ oder feste RB mit $V_N = 0$. Die stationäre Schrödingergleichung für die Koeffizienten c_j der Wellenfunktion zur Energie ε ,

$$H|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_j c_j|j\rangle, \quad (1.89)$$

läßt sich jedenfalls umschreiben in

$$(\varepsilon - \varepsilon_j)c_j = V_j c_{j+1} + V_{j-1}^* c_{j-1}. \quad (1.90)$$

In Matrixform schreiben wir das als

$$u_j = T_j u_{j-1}, \quad u_j \equiv \begin{pmatrix} c_{j+1} \\ c_j \end{pmatrix}, \quad T_j \equiv \begin{pmatrix} V_j^{-1}(\varepsilon - \varepsilon_j) & -V_j^{-1}V_{j-1}^* \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.91)$$

Falls $V_j = V = 1$ konstant ist, haben wir den einfachen Fall

$$T_j \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon - \varepsilon_j & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.92)$$

Mit der Gesamt-Transfermatrix

$$T(N) \equiv \prod_{j=1}^N T_j \quad (1.93)$$

erhalten wir jetzt

$$u_N = T_N u_{N-1} = T_N T_{N-1} u_{N-2} = \dots = T(N) u_0. \quad (1.94)$$

Hier müssen jetzt wieder die 'Randwerte' u_N und u_0 festgelegt werden. Der Anschluss bei $j = 1$ und $j = N$ und wird jetzt so gewählt, dass er einer Streusituation mit einlaufendem und reflektiertem Anteil (bei $j \leq 0$) sowie mit transmittiertem Anteil (bei $j \geq N$) entspricht; diese haben die Form

$$|\psi\rangle \propto t \sum_{j \geq N} e^{ikj} |j\rangle, \quad \text{transmittierter Anteil} \quad (1.95)$$

$$|\psi\rangle \propto \sum_{j \leq 1} (e^{ikj} + r e^{-ikj}) |j\rangle, \quad \text{einlauf. und refl. Anteil} \quad (1.96)$$

mit einem Wellenvektor k aus dem tight-binding Band $\varepsilon = \varepsilon_k = 2 \cos k$, der ebenen Wellen rechts und links vom Streubereich $j = 1, \dots, N$ entspricht. Also

$$u_N = \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_N \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} e^{ik(N+1)} \\ e^{ikN} \end{pmatrix}, \quad u_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik} + r e^{-ik} \\ 1 + r \end{pmatrix} \quad (1.97)$$

Damit folgt dann

$$t \begin{pmatrix} e^{ik(N+1)} \\ e^{ikN} \end{pmatrix} = T(N) \begin{pmatrix} e^{ik} + r e^{-ik} \\ 1 + r \end{pmatrix} \quad (1.98)$$

Wenn $T(N)$ für das Gitter bekannt ist, ist das ein 2×2 -Gleichungssystem, aus dem t und r berechnet werden können.

1.4.2 Höherdimensionale Gitter

Für Gitter mit Dimension $d > 1$ muss man sich jetzt zunächst überlegen, wie die Gitterplätze durchnummeriert werden sollen. Häufig benutzt man z.B. in quasi-eindimensionale Systeme, bei denen z.B. in $d = 3$ endliche $M \times M$ Quadratflächen (Scheiben) aneinandergesetzt werden (SKIZZE). Die Rekursionsgleichung in $d = 1$ für konstantes, reelles V , Gl. (1.90)

$$(\varepsilon - \varepsilon_j)c_j = Vc_{j+1} + Vc_{j-1}, \quad d = 1, \quad (1.99)$$

verallgemeinert sich dann zu

$$(\varepsilon - H_j)\mathbf{c}_j = V\mathbf{c}_{j+1} + V\mathbf{c}_{j-1}, \quad j = 1, \dots, N \quad (1.100)$$

wobei H_j und V jetzt $M^{d-1} \times M^{d-1}$ -Matrizen sind. Hierbei ist H_j die Projektion des Hamiltonians auf die j -te Scheibe, und V beschreibt das Hüpfen zwischen den Scheiben. Entsprechend zu Gl. (1.98) kann dieses $M^{d-1} \times N$ -dimensionale Gitter (typischerweise ist $N \gg M$) wieder an ebene Wellen senkrecht zu den Endflächen angeschlossen werden.

1.4.3 Gittermodelle mit Zufallsgrößen

Einteilchen-Gittermodelle der Form Gl. (1.87),

$$\mathcal{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{ij} V_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad V_{ij} = V_{ji}^*, \quad (1.101)$$

spielen eine große Rolle zur Modellierung von *Unordnung*, die z.B. durch Störstellen oder Verunreinigungen in kristallinen Festkörpern verursacht wird. Die elektronischen Streu- und damit Transporteigenschaften werden durch Unordnung stark beeinflusst. Die Unordnung selbst wird durch *Zufallsverteilungen* der Parameter des Hamiltonians \mathcal{H} beschrieben, im einfachsten Fall werden z.B. die Gitterenergien ε_i für jedes i unabhängig aus einer Verteilungsfunktion $P(\varepsilon_i)$ gewählt. Damit wird der Hamiltonian und alle aus ihm berechneten Größen selbst ein Zufallsobjekt.

Insbesondere werden die oben definierten Transfermatrizen $T(N)$, die auch für $d > 1$ definiert werden können, Zufallsgrößen. Hierzu gibt es ein relevantes Theorem (JANSSEN)

Satz 1 (Oseledec's Theorem). *Unter bestimmten Voraussetzungen existiert für zufällige Transfermatrizen $T(N)$ die Grenzmatrix*

$$T \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(T(N)T^\dagger(N) \right)^{\frac{1}{2N}}, \quad (1.102)$$

die für $2M \times 2M$ -Matrizen $T(N)$ Eigenwerte der Form

$$e^{\gamma_M}, \dots, e^{\gamma_1}, e^{-\gamma_1}, \dots, e^{\gamma_M} \quad (1.103)$$

mit Lyapunov-Exponenten $\gamma_1 < \dots < \gamma_M$ hat.

Die Eigenwerte kommen in Paaren wegen der Symplektizität der einzelnen T_j ,

$$T_j \begin{pmatrix} 0 & -\hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix} T_j^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.104)$$

Insbesondere gibt es in $d = 1$ Dimension mit $M = 1$ nur einen Lyapunov-Exponenten γ_1 für die *stochastische Rekursion* Gl. (1.90)

$$(\varepsilon - \varepsilon_j)c_j = Vc_{j+1} + Vc_{j-1}, \quad (1.105)$$

in der die Energien ε_j Zufallsgrößen sind. Im Fall $d = 1$ kann γ_1 durch die Rekursion leicht auf einem Computer berechnet werden (AUFGABE).

Definition Das Inverse des kleinsten Lyapunov-Exponenten heißt *Lokalisierungslänge*

$$\xi \equiv \gamma_1^{-1}. \quad (1.106)$$

Die Lokalisierungslänge beschreibt die Längenskala, auf der die Amplitude eines Eigenzustands eines Zufalls-Hamiltonians exponentiell abfällt. In einer Dimension $d = 1$ sind alle Eigenzustände exponentiell lokalisiert, und die Systeme werden zu elektronischen Isolatoren. In zwei Dimensionen ist das auch der Fall, während es in drei Dimensionen einen von der Energie und den Parametern der Zufallsverteilung abhängigen *Metal-Isolator-Übergang* (Anderson-Übergang) gibt ³

Für die Transmissionsmatrix t der quasi-eindimensionalen Struktur kann man jetzt weiterhin

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \text{Tr} t t^\dagger = -2\gamma_1 \quad (1.107)$$

zeigen (JANSSEN) und damit für den Leitwert

$$G \propto e^{-2\gamma_1 N}. \quad (1.108)$$

In einer Dimension $d = 1$ folgt dann aus einem weiteren Theorem von *Fürstenberg*, dass (wieder unter gewissen Voraussetzungen) $\gamma_1 > 0$. Das heißt, dass der Leitwert eines ungeordneten, eindimensionalen ‘Drahtes’ mit der Länge N exponentiell abfällt. Der Widerstand $R = 1/G \propto e^{2\gamma_1 N}$ wächst also exponentiell mit der Länge. Das ist aus Sicht des klassischen Ohmschen Gesetzes ein recht erstaunliches Resultat: Widerstände addieren sich jetzt also nicht mehr. Das Ohmsche Gesetz besagt nämlich folgendes: Der Leitwert $G(L)$ (also der inverse elektrische Widerstand $R(L)$) eines homogenen Kubus der Größe L^d (Länge L und Querschnitt L^{d-1} in d Dimensionen) wird gegeben durch

$$G(L) = \frac{I}{U} = \frac{jL^{d-1}}{EL} = \sigma L^{d-2}, \quad \text{Ohmsches Gesetz} \quad (1.109)$$

mit der konstanten (L -unabhängigen) *Leitfähigkeit* σ . Wenn der Querschnitt A konstant ist, wird hier L^{d-1} durch A ersetzt und man hat $R(L) = (A\sigma)^{-1}L$.

³ B. Kramer und A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

2. THEORIE DER LINEAREN ANTWORT

2.1 Die Suszeptibilität

Im Folgenden wiederholen wir zunächst den technischen Aufbau der Linear-Response-Theorie, wie wir ihn in der THERMODYNAMIK UND STATISTIK (SKRIPT) kennen gelernt haben.

2.1.1 Wechselwirkungsbild

Wir definieren das Wechselwirkungsbild über eine Aufspaltung des Gesamt-Hamiltonians

$$H \equiv H_0 + V \quad (2.1)$$

mit der Störung V . Sei $\rho(t)$ die Dichtematrix des Systems. Sie gehorcht der Liouville-von-Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)] \rightsquigarrow \rho(t) = e^{-iHt} \rho(t=0) e^{iHt}, \quad (2.2)$$

mit Anfangsbedingung $\rho(t=0)$. Wir definieren das Wechselwirkungsbild über

$$\tilde{\rho}(t) \equiv e^{iH_0 t} \rho(t) e^{-iH_0 t} \quad (2.3)$$

$$\tilde{A}(t) \equiv e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \quad (2.4)$$

für Observablen A . Damit erhält man die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= i[H_0, \tilde{\rho}(t)] + e^{iH_0 t} \frac{d}{dt}\rho(t) e^{-iH_0 t} \\ &= i[H_0, \tilde{\rho}(t)] - i e^{iH_0 t} [H, \rho(t)] e^{-iH_0 t} \\ &= i[H_0, \tilde{\rho}(t)] - i e^{iH_0 t} [H_0 + V, \rho(t)] e^{-iH_0 t} \\ &= i[H_0, \tilde{\rho}(t)] - i[H_0 + \tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)] \\ &= -i[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

In Integralform lautet die Lösung des Anfangswertproblems

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_0 - i \int_{t_0}^t dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')] \quad (2.6)$$

mit $\tilde{\rho}_0 \equiv \tilde{\rho}(t_0)$, wobei t_0 eine Anfangszeit ist. Bis hierhin ist noch alles exakt. Erwartungswerte von Observablen werden

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &\equiv \text{Tr} \rho(t) A = \text{Tr} \tilde{\rho}(t) \tilde{A}(t) = \text{Tr} \tilde{\rho}_0 \tilde{A}(t) - i \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')] \tilde{A}(t) \\ &= \text{Tr} \tilde{\rho}_0 \tilde{A}(t) - i \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \tilde{\rho}(t') [\tilde{A}(t), \tilde{V}(t')]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

2.1.2 Suszeptibilität

Definition Sei $H(t) = H_0 - f(t)B$ ein Hamiltonian mit Störoperator $-f(t)B$ (mit skalarer Funktion $f(t)$) und ρ_0 eine Dichtematrix zur Anfangszeit t_0 . Wir definieren die Abweichung des Erwartungswerts $\langle A \rangle_t$ für $t \geq t_0$ vom Wert für $f = 0$ in erster (linearer) Ordnung in f ,

$$\delta \langle A \rangle_t \equiv \int_{t_0}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t, t') f(t'), \quad t \geq t_0 \quad (2.8)$$

$$\chi_{AB}(t, t') \equiv i \text{Tr} \left(\tilde{\rho}_0 [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \right) \theta(t - t'), \quad \text{dynamische Suszeptibilität.} \quad (2.9)$$

Im exakten Ergebnis Gl. (2.6) haben wir also $\tilde{\rho}(t')$ durch $\tilde{\rho}_0$, d.h. die ungestörte Dichtematrix, ersetzt. Die Stufenfunktion $\theta(t - t')$ schneidet das Integral bei t ab und wird in die dynamische Suszeptibilität hineindefiniert. Dadurch wird garantiert, dass

$$\delta \langle A \rangle_t = 0, \quad t \leq t_0. \quad (2.10)$$

Beim Einschalten einer Störung zur Zeit t_0 erfolgt eine endliche Änderung des Erwartungswerts also erst *nach* dem Einschalten.

AUFGABE: Man überlege sich, wie man die obige Definition zu ändern hat, wenn man die Dichtematrix-Änderung ‘rückwärts’ in der Zeit, d.h. für $t < t_0$, verfolgen möchte.

Besonders interessante Fälle sind jetzt Gleichgewichtssituationen für ρ_0 :

Satz 2. Falls ρ_0 ein Gleichgewichtszustand zum Hamiltonian H_0 ist, d.h. falls $[\rho_0, H_0] = 0$, gilt

$$\chi_{AB}(t, t') = i \text{Tr} \left(\rho_0 [\tilde{A}(t - t'), \tilde{B}(0)] \right) \theta(t - t'). \quad (2.11)$$

(Beweis als AUFGABE, einfach). In diesem Fall, der uns im Folgenden interessieren wird, benutzt man der Übersicht halber dasselbe Symbol, $\chi_{AB}(t, t') = \chi_{AB}(t - t')$. Es gilt dann also

$$\chi_{AB}(t) \equiv i \text{Tr} \left(\rho_0 [\tilde{A}(t), B] \right) \theta(t). \quad (2.12)$$

In die Definition der dynamischen Suszeptibilität geht die Anfangszeit t_0 nicht mehr explizit ein, wohl aber in den Erwartungswert

$$\delta\langle A \rangle_t = \int_{t_0}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t-t') f(t'). \quad (2.13)$$

FALL 1: Wenn t_0 endlich ist, kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit $t_0 = 0$ annehmen und den Faltungssatz für Laplace-Transformationen verwenden,

$$\delta\langle A \rangle_t = \int_0^{\infty} dt' \chi_{AB}(t-t') f(t'), \quad \delta\langle A \rangle_z = \hat{\chi}_{AB}(z) \hat{f}(z) \quad (2.14)$$

$$\hat{f}(z) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{-zt} f(t), \quad \hat{\chi}_{AB}(z) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \chi_{AB}(t), \quad \Re(z) > 0. \quad (2.15)$$

Die Laplace-Transformation konvergiert in der rechten Halbebene (z.B. BRONSTEIN).

FALL 2: Häufiger wird der Fall $t_0 = -\infty$ benutzt, wo man den Faltungssatz für Fourier-Transformationen verwenden kann,

$$\delta\langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t-t') f(t'), \quad \delta\langle A \rangle_{\omega} = \tilde{\chi}_{AB}(\omega) \tilde{f}(\omega) \quad (2.16)$$

$$\tilde{f}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t), \quad \tilde{\chi}_{AB}(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{AB}(t). \quad (2.17)$$

Wegen $\chi_{AB}(t < 0) = 0$ haben in beiden Fällen die Integrale über $\chi_{AB}(t)$ die Untergrenze Null.

Es gilt weiterhin

Satz 3. Seien A und B hermitesch sowie $f(t) = f_0 \sin(\omega t) \theta(t)$ (periodische Störung wird zur Zeit $t = 0$ eingeschaltet). Dann gilt

$$\delta\langle A \rangle_{t \rightarrow \infty} = \Re \chi_{AB}(\omega) f_0 \sin \omega t - \Im \chi_{AB}(\omega) f_0 \cos \omega t. \quad (2.18)$$

Beweis: Zunächst ist für A und B hermitesch $\chi_{AB}(t)$ nach seiner Definition reell. Dann kann man die Definition für die Fouriertransformierte $\tilde{\chi}_{AB}(\omega)$ in Real- und Imaginärteil aufspalten und erhält (Additionstheorem für den Sinus) damit die obige Zerlegung.

2.1.3 Analytische Eigenschaften von $\tilde{\chi}_{AB}(\omega)$

Wir betrachten $\tilde{\chi}_{AB}(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{AB}(t)$ als Funktion einer komplexen Frequenz ω . Damit das Integral konvergiert, sollte $\Im(\omega) > 0$ gelten. Dann folgt: *Die dynamische Suszeptibilität $\tilde{\chi}_{AB}(\omega)$ ist analytisch in der oberen Halbebene.* Diese Eigenschaft hängt natürlich mit $t \geq t_0$ und der daraus resultierenden θ -Funktion in der Definition von $\chi_{AB}(t)$ zusammen, d.h. wir lösen ein Anfangswertproblem für die Änderung des Dichteoperators durch die Störung $-f(t)B$ und kein Endwertproblem, was häufig als 'Kausalität' bezeichnet wird.

Um herauszufinden, was für reelle ω passiert, wendet man den Cauchy-Integralsatz an,

$$\int_C \frac{\tilde{\chi}_{AB}(z)}{z - \omega} = 0, \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad (2.19)$$

wobei C der Halbkreis nach oben ist, der auf der reellen Achse den Punkt $z = \omega$ oben umfährt (SKIZZE). Explizit folgen damit dann durch die Zerlegung

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \tilde{\chi}_{AB}(\omega + i\delta) \equiv \chi'_{AB}(\omega) + i\chi''_{AB}(\omega) \quad (2.20)$$

die *Kramers-Kronig-Relationen* (AUFGABE)

$$\chi''_{AB}(\omega) = -P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi'_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (2.21)$$

$$\chi'_{AB}(\omega) = +P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (2.22)$$

Hierbei bezeichnen die Striche und Doppelstriche an χ nicht die Ableitungen, sondern Real- und Imaginärteil, und P steht für das Hauptwert-Integral.

Weiterhin folgt aus der Dirac-Identität

$$\frac{1}{x - i0} = P \frac{1}{x} + i\pi\delta(x) \quad (2.23)$$

die Darstellung

$$\tilde{\chi}_{AB}(z) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - z}, \quad \text{Lehmann-Spektraldarstellung,} \quad (2.24)$$

zunächst für $z = \omega + i0$ aus den Kramers-Kronig-Relationen für reelle ω und dann über analytische Fortsetzung als Integraldarstellung in der ganzen komplexen z -Ebene.

2.2 Das Fluktations-Dissipations-Theorem

Wir definieren zunächst Korrelationsfunktionen für hermitesche Operatoren \tilde{A} und B ,

$$\begin{aligned} C_{AB}^+(t) &\equiv \langle \tilde{A}(t)B \rangle_0, & C_{AB}^-(t) &\equiv \langle B\tilde{A}(t) \rangle_0 \\ C_{AB}^\pm(t) &\equiv S_{AB}(t) \pm iA_{AB}(t) \\ S_{AB}(t) &= \frac{1}{2} \langle \tilde{A}(t)B + B\tilde{A}(t) \rangle_0, & A_{AB}(t) &= \frac{1}{2i} \langle \tilde{A}(t)B - B\tilde{A}(t) \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.25)$$

mit reellen Funktionen $S_{AB}(t)$, $A_{AB}(t)$. Die Erwartungswerte beziehen sich jetzt auf einen thermischen Zustand,

$$\langle X \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} X, \quad Z \equiv \text{Tr} e^{-\beta H_0}. \quad (2.26)$$

Jetzt benutzen wir

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H_0} B \tilde{A}(t)) &= \mathrm{Tr}(e^{-\beta H_0} B e^{\beta H_0} e^{-\beta H_0} \tilde{A}(t)) = \mathrm{Tr}(\tilde{B}(i\beta) e^{-\beta H_0} \tilde{A}(t)) \\ &= \mathrm{Tr}(e^{-\beta H_0} \tilde{A}(t) \tilde{B}(i\beta)) = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H_0} \tilde{A}(t - i\beta) B) \\ &\rightsquigarrow C_{AB}^-(t) = C_{AB}^+(t - i\beta),\end{aligned}\quad (2.27)$$

was als *Kubo-Martin-Schwinger-Relation (KMS)* bezeichnet wird. Durch Fouriertransformation folgt

$$\tilde{C}_{AB}^-(\omega) = \tilde{C}_{AB}^+(\omega) e^{-\beta\omega}, \quad \text{detaillierte Gleichgewichtsrelation.} \quad (2.28)$$

In der Aufspaltung

$$\tilde{\chi}_{AB}(\omega) \equiv \tilde{\chi}'_{AB}(\omega) + i\tilde{\chi}''_{AB}(\omega) \quad (2.29)$$

wollen wir jetzt einen Zusammenhang zwischen $\tilde{\chi}''_{AB}(\omega)$ und $\tilde{C}_{AB}^+(\omega)$ herstellen. Dazu integrieren wir die Lehmann-Spektraldarstellung über $\frac{e^{-i\omega t}}{2\pi}$,

$$\chi_{AB}(t) = \lim_{i0 \rightarrow 0} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{2\pi} \tilde{\chi}(\omega + i0) = \lim_{i0 \rightarrow 0} \int \frac{d\omega'}{\pi} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{2\pi} \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega - i0}, \quad (2.30)$$

wofür wir folgendes Integral benötigen:

$$\int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{2\pi} \frac{1}{\omega' - \omega - i0} = i e^{-i\omega' t} \theta(t), \quad (2.31)$$

was aus dem Residuensatz folgt, denn der Pol liegt in der unteren ω -Ebene, in der man das Integral für $t > 0$ schliessen muss, damit der Halbkreisbeitrag verschwindet. Es gilt also

$$\chi_{AB}(t) = 2i\chi''_{AB}(t)\theta(t) \rightsquigarrow \chi''_{AB}(t) = \frac{1}{2} \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle_0. \quad (2.32)$$

Fouriertransformation liefert nun

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2} \left(\tilde{C}_{AB}^+(\omega) - \tilde{C}_{AB}^-(\omega) \right), \quad (2.33)$$

woraus aus dem detaillierten Gleichgewicht folgt

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\beta\omega} \right) \tilde{C}_{AB}^+(\omega), \quad \text{Fluktuations-Dissipations-Theorem} \quad (2.34)$$

(Callen, Welton 1951). Man kann es mittels der symmetrischen Korrelationsfunktion umschreiben,

$$\tilde{S}_{AB}(\omega) = \frac{1}{2} (\tilde{C}_{AB}^+(\omega) + \tilde{C}_{AB}^-(\omega)) = \frac{1}{2} \left(1 + e^{-\beta\omega} \right) \tilde{C}_{AB}^+(\omega), \quad (2.35)$$

und zwar in der Form

$$\tilde{S}_{AB}(\omega) = \chi''_{AB}(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2}. \quad (2.36)$$

Da $\chi''_{AB}(\omega)$ mit der Energieabsorption des Systems zusammenhängt (s.u.) und $\tilde{S}_{AB}(\omega)$ Fluktuationen beschreibt, erklärt sich der Name ‘Fluktuations-Dissipations-Theorem’.

2.2.1 Beispiel: harmonischer Oszillator

Wir betrachten die Orts-Orts-Korrelationsfunktion des harmonischen Oszillators im thermischen Gleichgewicht,

$$C^+(t) = \langle \tilde{x}(t)x \rangle_0, \quad H_0 = \Omega a^\dagger a \quad (2.37)$$

wobei der Ortsoperator durch Leiteroperatoren ausgedrückt wird,

$$x = \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} (a + a^\dagger), \quad \tilde{x}(t) = \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} (ae^{-i\Omega t} + a^\dagger e^{i\Omega t}). \quad (2.38)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} C^+(t) &= \langle \tilde{x}(t)x \rangle_0 = \frac{1}{2M\Omega} \langle aa^\dagger e^{-i\Omega t} + a^\dagger a e^{i\Omega t} \rangle = \frac{1}{2M\Omega} \{ (1 + n_B) e^{-i\Omega t} + n_B e^{i\Omega t} \} \\ &= \frac{1}{2M\Omega} \{ (1 + 2n_B) \cos \Omega t - i \sin \Omega t \}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

also

$$\langle \tilde{x}(t)x \rangle_0 = \frac{1}{2M\Omega} \left\{ \coth \frac{\beta\Omega}{2} \cos \Omega t - i \sin \Omega t \right\}, \quad \text{harmonischer Oszillator,} \quad (2.40)$$

wobei wir im letzten Schritt die Beziehung für die Bose-Einstein-Verteilung $n_B \equiv \frac{1}{e^{\beta\Omega} - 1}$,

$$1 + 2n_B = 1 + \frac{2}{e^{\beta\Omega} - 1} = \frac{e^{\beta\Omega} + 1}{e^{\beta\Omega} - 1} = \coth \frac{\beta\Omega}{2} \quad (2.41)$$

ausgenutzt haben. Aus $C^+(t) \equiv \langle \tilde{x}(t)x \rangle_0$ folgt jetzt direkt durch Ablesen der (anti)symmetrische Teil der Korrelationsfunktion,

$$\begin{aligned} S(t) &= \frac{1}{2M\Omega} \coth \frac{\beta\Omega}{2} \cos \Omega t, \quad A(t) = -\frac{1}{2M\Omega} \cos \Omega t \\ \rightsquigarrow S(\omega) &= \frac{1}{2M\Omega} \pi \{ \delta(\omega + \Omega) + \delta(\omega - \Omega) \} \coth \frac{\beta\Omega}{2} \\ &= \frac{1}{2M\Omega} \pi \{ -\delta(\omega + \Omega) + \delta(\omega - \Omega) \} \coth \frac{\beta\omega}{2} \\ \rightsquigarrow \tilde{\chi}_{xx}''(\omega) &= \frac{\pi}{2M\Omega} \{ -\delta(\omega + \Omega) + \delta(\omega - \Omega) \}, \end{aligned} \quad (2.42)$$

wobei wir im letzten Schritt das FDT benutzt haben, um $\tilde{\chi}_{xx}''(\omega)$ abzulesen. Andererseits erhalten wir das auch direkt mit

$$\begin{aligned}
\chi_{xx}(t) &= -2\theta(t)A_{xx}(t) = 2\theta(t)\frac{1}{2M\Omega}\sin\Omega t \\
\tilde{\chi}_{xx}''(\omega) &= \text{Im} \int_0^\infty dt \chi_{xx}(t)e^{i\omega t} = \text{Im} \frac{i}{2M\Omega} \int_0^\infty dt (e^{-i\Omega t} - e^{i\Omega t}) e^{i\omega t} \\
&= \frac{1}{2M\Omega} \int_0^\infty dt \{\cos(\omega - \Omega)t - \cos(\omega + \Omega)t\} \\
&= \frac{1}{2M\Omega} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt \{\cos(\omega - \Omega)t - \cos(\omega + \Omega)t\} \\
&= \frac{1}{2M\Omega} \frac{2\pi}{2} \{\delta(\omega - \Omega) - \delta(\omega + \Omega)\}. \tag{2.43}
\end{aligned}$$

2.2.2 Oszillator mit Ohmscher Dämpfung

(z.B. U. WEISS)

Definition Ein Oszillator mit Masse M , Eigenfrequenz ω_0 , Ortskoordinate x in einer Dimension und Ohmscher Dämpfungskonstante $\gamma > 0$ wird durch die Bewegungsgleichung

$$\ddot{x}(t) + \gamma\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = \frac{1}{M}f(t), \quad \gamma > 0 \tag{2.44}$$

beschrieben, wobei $f(t)$ eine äußere Kraft ist.

Wegen der Linearität der Bewegungsgleichung erfüllen die Erwartungswerte $\langle x \rangle_t$ der Ortskoordinate dieselbe Bewegungsgleichung, aus der wir damit sofort durch Fouriertransformation die dynamische Suszeptibilität erhalten,

$$\begin{aligned}
(-\omega^2 - i\gamma + \omega_0^2) \langle x \rangle_\omega &= \frac{1}{M} \tilde{f}(\omega) \rightsquigarrow \langle x \rangle_\omega \equiv \tilde{\chi}_{xx}(\omega) \tilde{f}(\omega) \\
\tilde{\chi}_{xx}(\omega) &= \frac{1}{M} \frac{1}{-\omega^2 - i\gamma + \omega_0^2}. \tag{2.45}
\end{aligned}$$

Es folgen Real- und Imaginärteil der Suszeptibilität zu

$$\chi'_{xx}(\omega) = \frac{1}{M} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(-\omega^2 + \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \tag{2.46}$$

$$\chi''_{xx}(\omega) = \frac{1}{M} \frac{\gamma\omega}{(-\omega^2 + \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}. \tag{2.47}$$

Interessant ist jetzt die Berechnung z.B. der symmetrisierten Korrelationsfunktion des Ortes,

$$S_{xx}(t) = \frac{1}{2} (\langle x(t)x \rangle_0 + \langle xx(t) \rangle_0) \tag{2.48}$$

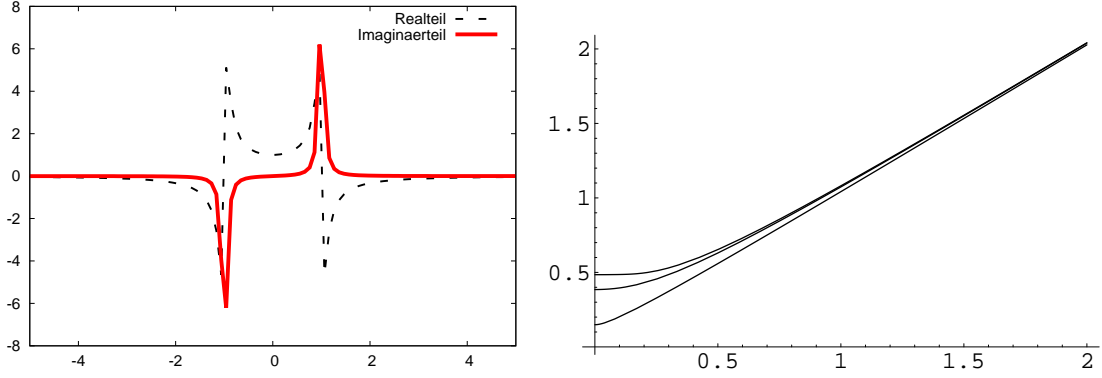


Fig. 2.1: Gedämpfter harmonischer Oszillator. LINKS: Real- und Imaginärteil von $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$. Rechts: $S_{xx}(t=0)/(M\omega_0^2)$ nach Gl. (2.49) als Funktion der Temperatur $k_B T/\hbar\omega_0$ für Dämpfungskonstanten $\gamma/\omega_0 = 0.1$ (obere Kurve) $\gamma/\omega_0 = 1$ und $\gamma/\omega_0 = 10$ (untere Kurve).

über das Fluktuations-Dissipations-Theorem. Zunächst wird in $S_{xx}(t)$ von einem thermischen Gleichgewichtszustand ρ_0 mit Temperatur T und $\langle x \rangle_0 = 0$ ausgegangen. Der entscheidende Punkt hier ist nun, dass man für die Berechnung von Gleichgewichtsfuktuationen (z.B. $S_{xx}(t=0)$) ρ_0 nicht explizit zu kennen braucht. In der Tat ist die Herleitung der Bewegungsgleichung aus einem mikroskopischem Hamiltonian nicht-trivial und erfordert z.B. mikroskopische System-Bad-Modelle (z.B. WEISS). Durch das FDT ist man aber zum Glück trotzdem in der Lage, diese Gleichgewichtsfuktuationen zu berechnen.

Konkret haben wir also

$$S_{xx}(t) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \tilde{S}_{xx}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \chi''_{xx}(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} \quad (2.49)$$

$$= \frac{1}{2\pi M} \int dt e^{-i\omega t} \frac{\gamma\omega}{(-\omega^2 + \omega_0^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \coth \frac{\beta\omega}{2}. \quad (2.50)$$

2.2.3 Energieabsorption

Es ist klar, dass mit einem zeitabhängigen Hamiltonian $H(t) = H_0 - f(t)B$ die Energie keine Erhaltungsgröße ist: durch die zeitabhängige Störung wird Energie in das System hineingesteckt.

Man kann aber formal den ungestörten Hamiltonian H_0 weiterhin als Energieoperator auffassen und dessen Erwartungswert berechnen: Aus der Liouville-von-Neumann-Gleichung folgt zunächst

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle_t &= \text{Tr} \rho_0 \tilde{H}_0(t) + i \int_{t_0}^t dt' f(t') \text{Tr} \tilde{\rho}(t') [\tilde{H}_0(t), \tilde{B}(t')] \\ &= \text{Tr} \rho_0 H_0 + i \int_{t_0}^t dt' f(t') \text{Tr} \tilde{\rho}(t') [H_0, \tilde{B}(t')] = \langle H_0 \rangle_0 + \int_{t_0}^t dt' f(t') \text{Tr} \tilde{\rho}(t') \frac{d}{dt'} \tilde{B}(t') \end{aligned} \quad (2.51)$$

Im letzten Term haben wir

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \tilde{\rho}(t') \frac{d}{dt'} \tilde{B}(t') &= \frac{d}{dt'} \text{Tr} \tilde{\rho}(t') \tilde{B}(t') - \text{Tr} \frac{d}{dt'} (\tilde{\rho}(t')) \tilde{B}(t') \\
&= \frac{d}{dt'} \text{Tr} \tilde{\rho}(t') \tilde{B}(t') - i f(t') \text{Tr} [\tilde{B}(t'), \tilde{\rho}(t')] \tilde{B}(t') \\
&= \frac{d}{dt'} \text{Tr} \tilde{\rho}(t') \tilde{B}(t') = \frac{d}{dt'} \langle B \rangle_{t'}
\end{aligned} \tag{2.52}$$

und damit haben wir

$$\delta \langle H_0 \rangle_t = \int_{t_0}^t dt' f(t') \frac{d}{dt'} \langle B \rangle_{t'}. \tag{2.53}$$

Jetzt definieren wir

$$\begin{aligned}
\Delta E &\equiv \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty} \delta \langle H_0 \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') \frac{d}{dt'} \langle B \rangle_{t'} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{f}(-\omega) (-i\omega) \langle B \rangle_{\omega},
\end{aligned} \tag{2.54}$$

wobei wir im letzten Schritt die Parsevalsche Gleichung der Fouriertransformation benutzen. Bis hierher ist noch alles exakt, aber jetzt machen wir eine linear-response-Näherung für

$$\langle B \rangle_{\omega} = \langle B \rangle_0 + \tilde{\chi}_{BB}(\omega) \tilde{f}(\omega) + O(f^2). \tag{2.55}$$

Wenn $f(t)$ reell ist, gilt $\tilde{f}(-\omega) = f^*(\omega)$, und wir erhalten

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 (-i\omega) \tilde{\chi}_{BB}(\omega). \tag{2.56}$$

Wegen der Symmetrien

$$\tilde{\chi}'_{BB}(\omega) = \tilde{\chi}'_{BB}(-\omega), \quad \tilde{\chi}''_{BB}(\omega) = -\tilde{\chi}''_{BB}(-\omega) \tag{2.57}$$

folgt also

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega \tilde{\chi}''_{BB}(\omega) |f(\omega)|^2. \tag{2.58}$$

2.3 Die Relaxationsfunktion

(z.B. BRENIG, VL Prof. W. Zwerger Göttingen 1989). Ein zweiter Ansatz für linearen Antwortfunktionen ist das *Ausschalten* einer Störung $-fB$ zur Zeit $t = 0$, d.h.

$$H(t) = H_0 - fB\theta(-t). \tag{2.59}$$

Zur Zeit $t = 0$ sei das System im thermischen Zustand

$$\rho \equiv \frac{e^{-\beta(H_0 - fB)}}{Z}, \quad Z \equiv \text{Tr} e^{-\beta(H_0 - fB)}, \quad (2.60)$$

der für $t \geq 0$ wegen $[H_0 - fB, H_0] \neq 0$ ein Nichtgleichgewichtszustand ist (Ausnahme: $[H_0, B] = 0$).

Wir berechnen die Zeitentwicklung des Erwartungswerts einer Observable A ,

$$\langle A(t) \rangle \equiv \text{Tr} \rho A(t), \quad A(t) \equiv e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \quad (2.61)$$

Hier ist die Zeitentwicklung der Observable ‘einfach’ (mit H_0) und der Zustand ρ_0 ‘schwierig’ (Störung $-fB$ vorhanden), so dass wir eine Störungstheorie für ρ_0 ansetzen: dazu definieren wir eine Wechselwirkungsbild gemäß

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} = U(\beta) e^{-\beta H_0} &\rightsquigarrow U'(\beta) = \partial_\beta e^{-\beta H} e^{\beta H_0} = e^{-\beta H} (-H + H_0) e^{\beta H_0} \\ &= f e^{-\beta H} e^{\beta H_0} e^{-\beta H_0} B e^{\beta H_0}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

also

$$U'(\beta) = f U(\beta) B(i\beta), \quad B(i\beta) \equiv e^{-\beta H_0} B e^{\beta H_0}. \quad (2.63)$$

Iteration bis zur ersten Ordnung in f ergibt

$$U(\beta) = 1 + f \int_0^\beta d\beta' B(i\beta') + O(f^2). \quad (2.64)$$

Die Zustandssumme wird dann

$$\begin{aligned} Z &\equiv \text{Tr} e^{-\beta(H_0 - fB)} = \text{Tr} U(\beta) e^{-\beta H_0} = \text{Tr} \left(1 + f \int_0^\beta d\beta' B(i\beta') + \dots \right) e^{-\beta H_0} \\ &= Z_0 \left(1 + f \int_0^\beta d\beta' \langle B(i\beta') \rangle_0 \right) + O(f^2), \quad Z_0 \equiv \text{Tr} e^{-\beta H_0}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

wobei der Erwartungswert $\langle \dots \rangle_0$ mit ρ_0 berechnet wird. Damit hat man

$$\begin{aligned} \rho &\equiv \frac{e^{-\beta(H_0 - fB)}}{Z} = \left(1 + f \int_0^\beta d\beta' B(i\beta') + \dots \right) \left(1 - f \int_0^\beta d\beta' \langle B(i\beta') \rangle_0 + \dots \right) \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} \\ &= \left(1 + f \int_0^\beta d\beta' (B(i\beta') - \langle B(i\beta') \rangle_0) \right) \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} + O(f^2) \end{aligned} \quad (2.66)$$

und somit

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle A(t) \rangle_0 + f \int_0^\beta d\beta' (\langle A(t) B(i\beta') \rangle_0 - \langle A(t) \rangle_0 \langle B(i\beta') \rangle_0) + O(f^2) \\ &= \langle A \rangle_0 + f \int_0^\beta d\beta' (\langle A(t) B(i\beta') \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle B(i\beta') \rangle_0) + O(f^2). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Im letzten Schritt haben wir $\langle A(t) \rangle_0 = \langle A \rangle_0$ benutzt. Formal wird dieses Ergebnis jetzt geschrieben als

$$\delta\langle A(t) \rangle = f\Phi_{AB}(t) \quad (2.68)$$

$$\Phi_{AB}(t) \equiv \langle A(t)|B^\dagger \rangle, \quad \text{Relaxationsfunktion } \Phi_{AB}(t), \quad t > 0 \quad (2.69)$$

mit der Definition

$$\langle A(t)|B \rangle \equiv \int_0^\beta d\beta' \left(\langle A(t)B^\dagger(i\beta') \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle B^\dagger(i\beta') \rangle_0 \right), \quad \text{Mori-Skalarprodukt.} \quad (2.70)$$

$$B^\dagger(i\beta) = e^{-\beta H_0} B^\dagger e^{\beta H_0}. \quad (2.71)$$

2.3.1 Thermische Suszeptibilität

Für $t = 0$ kann man aus dem Ergebnis für $\delta\langle A(t) \rangle$ das Ergebnis der rein thermodynamischen Störungstheorie ablesen: wir haben den thermischen Zustand in erster Ordnung in f und damit die Änderung der Erwartungswerte

$$\chi_{AB}^{\text{th}} \equiv \partial_f \text{Tr} \rho A|_{f=0} = \Phi_{AB}(0), \quad \text{thermische Suszeptibilität,} \quad (2.72)$$

es gilt also

$$\chi_{AB}^{\text{th}} = \Phi_{AB}(0) = \int_0^\beta d\beta' \left(\langle AB(i\beta') \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle B(i\beta') \rangle_0 \right). \quad (2.73)$$

2.3.2 Klassischer Limes für $\Phi_{AB}(t)$

Im klassischen Limes werden aus den Operatoren A und B c-Zahlen. Insbesondere hat man dann im Mori-Skalarprodukt $B(i\beta') = B$ und deshalb

$$\Phi_{AB}^{\text{cl}}(t) = \beta \left(\langle A(t)B \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0 \right) = \beta \langle \delta A(t) \delta B \rangle_0 \quad (2.74)$$

mit $\delta A(t) \equiv A(t) - \langle A \rangle_0$ und $\delta B \equiv B - \langle B \rangle_0$. Die Relaxationsfunktion läßt sich also durch die Fluktuationen im ungestörten Gleichgewicht ausdrücken. Insbesondere gilt für die thermische Suszeptibilität im klassischen Limes

$$\chi_{AB}^{\text{th,cl}} = \beta \langle \delta A \delta B \rangle_0 \quad (2.75)$$

Manchmal wird bereits dieser Zusammenhang als eine Manifestation des Fluktuations-Dissipations-Theorems bezeichnet.

BEISPIEL: Im großkanonischen Ensemble hatten wir in der THERMODYNAMIK gefunden, dass

$$\chi_{NN}^{\text{th,cl}} \equiv \frac{\partial}{\partial \mu} \langle N \rangle = \frac{\kappa_T \langle N \rangle^2}{V}, \quad (2.76)$$

wobei κ_T die isotherme Kompressibilität ist und V das Volumen. Die Suszeptibilität gibt hier also die Änderung der mittleren Teilchenzahl bei einer Änderung des chemischen Potentials μ , gemäß

$$H = H_0 - \mu N \quad (2.77)$$

also mit $f = \mu$ und $B = N$ (Gesamtteilchenzahloperator) in unserer Terminologie. Die zweite Kumulante κ_2 der Verteilung p_n der fluktuierenden Teilchenzahl war andererseits

$$\kappa_2 \equiv \langle \delta N \delta N \rangle = \frac{k_B T \kappa_T \langle N \rangle^2}{V}, \quad (2.78)$$

also

$$\chi_{NN}^{\text{th,cl}} = \frac{\partial}{\partial \mu} \langle N \rangle = \frac{1}{k_B T} \langle \delta N \delta N \rangle, \quad (2.79)$$

was mit unserem allgemeinen Ergebnis übereinstimmt.

2.3.3 Zusammenhang zwischen χ - und Φ -Funktion

In der Definition der linearen Antwort über die Suszeptibilität

$$\delta \langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^t dt' \chi_{AB}(t-t') f(t') \quad (2.80)$$

(Anfangszeit $t_0 = -\infty$) setzen wir für die äußere Kraft

$$f(t) = f\theta(-t) \quad (2.81)$$

und erhalten dann

$$\delta \langle A \rangle_t = f \int_{-\infty}^0 dt' \chi_{AB}(t-t') = f \int_t^{\infty} dt' \chi_{AB}(t') \equiv f \Phi_{AB}(t), \quad (2.82)$$

wobei wir die Definition der Relaxationsfunktion Gl. (2.68) benutzt haben. Durch Differentiation nach t folgt also der allgemeine Zusammenhang

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{\partial}{\partial t} \Phi_{AB}(t). \quad (2.83)$$

2.4 Die Kubo-Formel für die Leitfähigkeit

(BRUUS/FLENSBERG) Der allgemeinste lineare Zusammenhang zwischen Stromdichte \mathbf{j} und elektrischem Feld \mathbf{E} lautet

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'), \quad (2.84)$$

wobei σ eine Matrix ist und sich die \mathbf{r}' -Integration über den ganzen Raum erstreckt.

Der Operator der Ladungsstromdichte für Teilchen der Masse m_l , Ladung q_l mit Orts- und Impuls-Operatoren \mathbf{x}_l , \mathbf{p}_l ist in erster Quantisierung

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) = \sum_l \frac{q_l}{2m_l} \left[\left(\mathbf{p}_l - \frac{q_l}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \left(\mathbf{p}_l - \frac{q_l}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \right]. \quad (2.85)$$

Hierbei ist $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ das Vektorpotential, das über

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t). \quad (2.86)$$

das elektrische Feld erzeugen soll. Die Eichung ist so gewählt, dass das skalare Potential verschwindet. Der Stromdichteoperator besteht also aus zwei Anteilen;

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) &= \hat{\mathbf{j}}_p(\mathbf{r}, t) - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \sum_l \frac{q_l^2}{m_l c} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \\ \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) &\equiv \sum_l \frac{q_l}{2m_l} [\mathbf{p}_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \mathbf{p}_l], \quad \text{paramagnetischer Strom} \end{aligned} \quad (2.87)$$

Der zweite (diamagnetische) Term in $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t)$ ist bereits in erster Ordnung in \mathbf{A} . Wir benötigen also nur noch die lineare Antwort des paramagnetischen Stroms auf das Feld \mathbf{A} , das in erster Ordnung Störungstheorie einen zeitabhängigen Störoperator erzeugt. Dieser kommt aus der kinetischen Energie der Ladungen (minimale Kopplung)

$$\begin{aligned} H &= \sum_l \frac{1}{2m_l} \left(\mathbf{p}_l - \frac{q_l}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_l, t) \right)^2 = \sum_l \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m_l} - \sum_l \frac{q_l}{2m_l c} [\mathbf{p}_l \mathbf{A}(\mathbf{r}_l, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_l, t) \mathbf{p}_l] + O(\mathbf{A}^2) \\ &= \sum_l \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m_l} - \int d\mathbf{r} \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + O(\mathbf{A}^2), \end{aligned} \quad (2.88)$$

2.4.1 Linear-Response-Ausdruck

Der Störoperator hat also die Form

$$- \frac{1}{c} \int d\mathbf{r} \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (2.89)$$

ist also eine lineare Überlagerung von Operatoren vom Typ $-f(t)B$ in Gl. (2.8). Entsprechend dem Ausdruck Gl. (2.8),

$$\delta \langle A \rangle_t \equiv \int_{-\infty}^t dt' \chi_{AB}(t-t') f(t'), \quad \chi_{AB}(t-t') \equiv i \text{Tr} \left(\tilde{\rho}_0 [\tilde{A}(t-t'), \tilde{B}] \right) \theta(t-t') \quad (2.90)$$

(Gleichgewichtskorrelationsfunktion) erhalten wir jetzt

$$\langle \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \rangle_t = i \text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' \left(\rho_0 [\hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}, t-t'), \int d\mathbf{r}' \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}', t')] \right) + O(\mathbf{A}^2), \quad (2.91)$$

wobei im Gleichgewicht $\langle \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \rangle_0 = 0$, weshalb also die Abweichung vom Gleichgewichtswert $\delta \langle \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \rangle_t = \langle \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \rangle_t$. In Komponenten $\alpha, \beta = x, y, z$ ausgeschrieben ist das

$$\langle \hat{j}_\alpha^p(\mathbf{r}) \rangle_t = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') \frac{1}{c} A_{\beta}(\mathbf{r}', t') \quad (2.92)$$

für den paramagnetischen Strom mit

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \equiv i\theta(t) \text{Tr} \left(\rho_0 [\tilde{j}_\alpha^p(\mathbf{r}, t), j_\beta^p(\mathbf{r}')] \right), \quad \text{Strom-Strom-Korrelationsfunktion.} \quad (2.93)$$

Für den gesamten Strom gilt also

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_\alpha(\mathbf{r}) \rangle_t &= \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') \frac{1}{c} A_{\beta}(\mathbf{r}', t') \\ &- \sum_l \frac{q_l^2}{m_l c} \text{Tr} (\rho_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l)) \frac{1}{c} A_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.94)$$

Hierbei ist $\text{Tr} (\rho_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l))$ die dem l -ten Teilchen entsprechende (Wahrscheinlichkeits-) Dichte an der Stelle \mathbf{r} im Gleichgewichtszustand, der wie immer durch ρ_0 bezeichnet wird und natürlich das Feld \mathbf{A} nicht enthält. Wenn wir mehrere Teilchensorten $s = 1, \dots, N_s$ mit Ladungen q_s und Massen m_s unterscheiden wollen, können wir die Summen über alle Teilchen l nach Sorten aufspalten,

$$\sum_l \frac{q_l^2}{m_l c} \text{Tr} (\rho_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l)) = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{q_s^2}{m_s c} n_s, \quad (2.95)$$

wobei n_s die *Teilchen-Dichte* der Teilchensorte s ist. Entsprechend kann man dann den paramagnetischen Strom als Summe

$$\hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) = \sum_{s=1}^{N_s} \hat{\mathbf{j}}_s^p(\mathbf{r}) \quad (2.96)$$

schreiben.

Fouriertransformation gibt jetzt mit dem Faltungssatz

$$\langle \hat{j}_\alpha(\mathbf{r}) \rangle_\omega = \int d\mathbf{r}' \sum_{\beta} \left[\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) - \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{s=1}^{N_s} \frac{q_s^2}{m_s} n_s \right] \frac{1}{c} \tilde{A}_{\beta}(\mathbf{r}', \omega). \quad (2.97)$$

Diese Form ist jetzt übersichtlicher, denn sie ist ‘lokal’ in der Frequenz ω . Entsprechend können wir jetzt endlich das elektrische Feld einführen;

$$\tilde{A}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = \frac{c}{i\omega} \tilde{E}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.98)$$

und erhalten damit den Leitfähigkeitstensor

$$\langle \hat{j}_\alpha(\mathbf{r}) \rangle_\omega = \int d\mathbf{r}' \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \tilde{E}_\beta(\mathbf{r}', \omega) \quad (2.99)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \equiv \frac{\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) - \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{s=1}^{N_s} \frac{q_s^2}{m_s} n_s}{i\omega}. \quad (2.100)$$

2.4.2 Homogene Leitfähigkeit

In räumlich homogenen Systemen können wir Gl. (2.100) räumlich Fourier-transformieren;

$$\langle \hat{j}_\alpha(\mathbf{r}) \rangle_\omega = \int d\mathbf{r}' \sum_\beta \overline{\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)} \tilde{E}_\beta(\mathbf{r}', \omega) \quad (2.101)$$

$$\rightsquigarrow \langle \tilde{j}_\alpha(\mathbf{q}) \rangle_\omega = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}; \omega) \tilde{E}_\beta(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.102)$$

Hierbei ist

$$\tilde{E}_\beta(\mathbf{q}, \omega) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tilde{E}_\beta(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.103)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \overline{\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)}, \quad (2.104)$$

wobei V das Systemvolumen bezeichnet. Der Strich deutet hier an, dass die Abhängigkeit von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ i.A. erst durch einen räumlichen Mittelungsprozess entstehen kann, da in der mikroskopischen Definition von Gl. (2.93) ja beide Ortsvariablen noch unabhängig sind. Mit der obigen Definition der Fouriertransformation nimmt man das Ergebnis dieses Mittelungsprozesses praktisch schon vorweg. Im allgemeinen ist das nur in makroskopischen Systemen gerechtfertigt, wo man im Mittel Translationsinvarianz erwarten kann.

Für gleiche Ladungen $q_l = -e$ und Massen $m_l = m$ haben wir dann für die paramagnetischen Stromdichten in $\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$, Gl. (2.93),

$$\tilde{\mathbf{j}}_p(\mathbf{q} = 0) = -e\mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = \sum_l \frac{1}{m} \mathbf{p}_l, \quad \text{Geschwindigkeitsoperator}, \quad (2.105)$$

man bekommt also insgesamt

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q} = 0, \omega) \equiv \frac{e^2}{V} \frac{\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\omega) - \delta_{\alpha\beta} \frac{N}{m}}{i\omega} \quad (2.106)$$

$$\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\omega) \equiv i\theta(t) \text{Tr}(\rho_0[\tilde{v}_\alpha(t), v_\beta]), \quad \text{Geschwindigkeitskorrelator}, \quad (2.107)$$

wobei N die Teilchenzahl ist. Weiterhin kann man jetzt zeigen (AUFGABE), dass die thermische Suszeptibilität für den Geschwindigkeitskorrelator

$$\chi_{\alpha\beta}^{\text{th}} = \delta_{\alpha\beta} \frac{N}{m} \quad (2.108)$$

erfüllt.

Der Leitfähigkeitstensor kann jetzt mit der oben eingeführten Relaxationsfunktion Φ verknüpft werden. Dazu erinnern wir uns noch einmal an Gl. (2.72) und Gl. (2.83),

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{\partial}{\partial t}\Phi_{AB}(t), \quad \chi_{AB}(t=0) = \chi_{AB}^{\text{th}} \quad (2.109)$$

Fouriertransformation mit

$$\tilde{\Phi}_{AB}(z) \equiv \int_0^\infty dt e^{izt} \Phi_{AB}(t) \quad (2.110)$$

liefert

$$\tilde{\Phi}_{AB}(z) = \frac{\tilde{\chi}_{AB}(z) - \chi_{AB}^{\text{th}}}{iz}. \quad (2.111)$$

Das hat genau die Struktur des Ausdrucks Gl. (2.106) für den Leitfähigkeitstensor, wir haben also

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{V} \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega), \quad \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle \tilde{v}_\alpha(t) | v_\beta \rangle, \quad \text{Kubo-Formel.} \quad (2.112)$$

2.4.3 Lorentz–Drude–Modell

Bevor wir mit der bis jetzt doch recht formalen Theorie fortfahren, schieben wir hier eine Wiederholung des phänomenologischen Modells zur Leitfähigkeit und dielektrischen Funktion ein (SKRIPT ELEKTRODYNAMIK).

(JACKSON) Wir erstellen ein einfaches mikroskopischen Modell für ein *Dipolmoment* \mathbf{p} : Eine Ladung $-e < 0$ führt gedämpfte harmonische Schwingungen um eine Ruhelage \mathbf{R} mit Kreisfrequenz ω_0 und Dämpfungskonstante $\gamma > 0$ unter dem Einfluss der Kraft $-e\mathbf{E}$ aus. Die Bewegungsgleichung für Auslenkungen $\mathbf{x}(t)$ aus der Ruhelage lautet

$$\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}} + \omega_0^2\mathbf{x} = -\frac{e}{m}\mathbf{E}(t) \quad (2.113)$$

wobei ein räumlich homogenes aber zeitlich veränderliches elektrisches Feld $\mathbf{E}(t)$ angenommen wird. Daraus ergibt sich ein Dipolmoment $\mathbf{p}(t) = -e\mathbf{x}(t)$. Im Frequenzraum erhält man also den linearen Zusammenhang

$$\tilde{\mathbf{p}}(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{\tilde{\mathbf{E}}(\omega)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}. \quad (2.114)$$

Hat man $j = 1, \dots, K$ Sorten von Ladungen e_j mit Massen m_j , Dämpfungskonstanten $\gamma_j > 0$, Frequenzen ω_j und Dichten n_j , so erhält man mit diesem Modell eine Polarisation (Dipolmoment pro Volumen)

$$\tilde{\mathbf{P}}(\omega) = \sum_{j=1}^K \frac{n_j e_j^2}{m_j} \frac{\tilde{\mathbf{E}}(\omega)}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j} \quad (2.115)$$

und dementsprechend eine dielektrische Verschiebung

$$\tilde{\mathbf{D}}(\omega) = \varepsilon_0 \tilde{\mathbf{E}}(\omega) + \tilde{\mathbf{P}}(\omega) = \tilde{\varepsilon}(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\omega) \quad (2.116)$$

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 + \sum_{j=1}^K \frac{n_j e_j^2}{\varepsilon_0 m_j} \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j} \right). \quad (2.117)$$

Die dielektrische Funktion $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ hat für das Lorentz-Modell einige wichtige Eigenschaften, die auch ganz allgemein gelten:

- $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ ist komplexwertig, Real- und Imaginärteil von $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ hängen über Hilbert-Integraltransformationen (*Kramers-Kronig-Relationen*) miteinander zusammen (z.B. FLIESSBACH).
- Die Pole von $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ liegen in der unteren komplexen ω -Ebene.
- Es gilt

$$\Re \tilde{\varepsilon}(\omega) = \Re \tilde{\varepsilon}(-\omega), \quad \Im \tilde{\varepsilon}(\omega) = -\Im \tilde{\varepsilon}(-\omega), \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (2.118)$$

Falls in einem Medium frei bewegliche Ladungen vorhanden sind, hat man

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mathbf{j}}_f(\mathbf{r}, \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.119)$$

Wir nehmen an, dass die freie Stromdichte $\tilde{\mathbf{j}}_f(\mathbf{r}, \omega)$ proportional zum elektrischen Feld ist (*Ohmsches Gesetz*),

$$\tilde{\mathbf{j}}_f(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega), \quad \text{Leitfähigkeit } \sigma(\omega). \quad (2.120)$$

Dann hat man

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) = \tilde{\mu}(\omega) [\sigma(\omega) - i\tilde{\varepsilon}(\omega)\omega] \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.121)$$

$$= -i\tilde{\mu}(\omega)\tilde{\varepsilon}_{\text{tot}}(\omega)\omega \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.122)$$

mit der gesamten dielektrischen Funktion

$$\tilde{\varepsilon}_{\text{tot}}(\omega) \equiv \tilde{\varepsilon}(\omega) + i\frac{\sigma(\omega)}{\omega}. \quad (2.123)$$

Damit diese im Rahmen des Lorentz-Modells wieder von der Form Gl. (2.116) ist, schreiben wir

$$\tilde{\varepsilon}_{\text{tot}}(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 + \sum_{j=1}^K \frac{n_j e_j^2}{\varepsilon_0 m_j} \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j} \right) + \varepsilon_0 \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m} \frac{1}{\omega_f^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \quad (2.124)$$

und identifizieren

$$\frac{ne^2}{m} \frac{1}{\omega_f^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} = i\frac{\sigma(\omega)}{\omega} \rightsquigarrow \omega_f = 0, \quad \sigma(\omega) = -i\omega \frac{ne^2}{m} \frac{1}{-\omega^2 - i\omega\gamma}, \quad (2.125)$$

also einem expliziten Ausdruck für die frequenzabhängige Leitfähigkeit der Form

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}, \tau \equiv \gamma^{-1}, \quad \text{Drude-Modell.} \quad (2.126)$$

Formal erhält man also einen Ausdruck für die *Leitfähigkeit* des Mediums im Rahmen des Lorentz-Modells für die *dielektrische Funktion* des Mediums, indem man für die freien Ladungsträger mit Dichte n , Masse m und Ladung e eine verschwindende Oszillatorfrequenz $\omega_f = 0$ ansetzt. Die im Lorentz-Modells auftretende Dämpfungskonstante γ^{-1} wird dabei als eine Streurrate für die freien Ladungsträger interpretiert. Interessant ist hierbei, dass ein voll mikroskopisches Modell für die Ohmsche Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ eines Materials im Rahmen gewisser Näherungen auf dasselbe Ergebnis führt, freilich mit einem expliziten Ausdruck für τ (z.B. durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung verursachte Streuung).

Wenn das Medium nur freie Ladungen enthält und keine Polarisation auftritt, hat man $\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_0$ und somit

$$\tilde{\epsilon}_{\text{tot}}(\omega) = \epsilon_0 + i \frac{\sigma(\omega)}{\omega}. \quad (2.127)$$

Ein solches System wird häufig als *Metall* bezeichnet, es entspricht den Leitern, die wir in der Elektrostatik abstrakt eingeführt haben. Für Frequenzen mit $\omega\tau \gg 1$ gilt insbesondere

$$\frac{\tilde{\epsilon}_{\text{tot}}(\omega)}{\epsilon_0} \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega\tau \gg 1, \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}, \quad \text{Plasmafrequenz } \omega_p. \quad (2.128)$$

Für Frequenzen $\omega < \omega_p$ wird $\tilde{\epsilon}_{\text{tot}}$ negativ und der Brechungsindex rein imaginär: Strahlung mit solchen Frequenzen kann im Metall nicht propagieren, das Metall ist für solche Frequenzen undurchsichtig. Oberhalb der Plasmafrequenz ($\omega > \omega_p$) hingegen wird $\tilde{\epsilon}_{\text{tot}}$ positiv und der Brechungsindex rein reell - das Metall ist dann durchsichtig. Wir stellen uns das Metall als freie Elektronen mit einem festen positiven Hintergrund (Ionenlattice) vor. Die Gesamtladung des Metalls ist Null, die Gesamtladungsdichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ kann aber für Frequenzen oberhalb der Plasmafrequenz oszillieren, was einer kollektiven Schwingung aller Elektronen entspricht (z.B. SKRIPT FESTKÖRPERTHEORIE; ASHCROFT/MERMIN).

AUFGABE: Betrachte ein Medium mit nur freien Ladungen, in dem ein Ohmsches Gesetz

$$\tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{q}, \omega) = \sigma(\mathbf{q}, \omega) \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{q}, \omega), \quad \text{skalare Leitfähigkeit } \sigma(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.129)$$

gelten soll.

1. Begründe die Form Gl. (2.129) aus dem allgemeinsten linearen Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und Stromdichte im raum-zeitlich translationsinvarianten und isotropen Fall.

2. Ausgehend von der longitudinalen dielektrischen Funktion $\epsilon_l(\mathbf{q}, \omega)$, Gl. (??), soll der Zusammenhang

$$\epsilon_l(\mathbf{q}, \omega) = 1 + i \frac{\sigma(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon_0 \omega} \quad (2.130)$$

hergeleitet werden (beachte, dass die dielektrische Funktion hier dimensionslos definiert ist und deshalb im Vergleich zu Gl. (2.123) der Faktor ε_0 im Nenner auftritt). Benutze für die Herleitung den Zusammenhang zwischen externem elektrischen Potential V_{ext} und vollem elektrischen Potential V , sowie die Kontinuitätsgleichung.

2.4.4 Drude-Modell für die Relaxationfunktion

Wenn wir das Drude-Resultat mit der exakten Kubo-Formel Gl. (2.112) vergleichen,

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega}, \quad \text{Drude-Modell} \quad (2.131)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{V} \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega), \quad \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle \tilde{v}_\alpha(t) | v_\beta \rangle, \quad \text{Kubo-Formel, (2.132)}$$

liegt ein phänomenologischer Ansatz für das Mori-Skalarprodukt $\langle \tilde{v}_\alpha(t) | v_\beta \rangle$ der Geschwindigkeitsoperatoren

$$\mathbf{v} = \sum_{l=1}^N \frac{\mathbf{p}_l}{m} \quad (2.133)$$

mit einer exponentiell abfallenden Korrelation auf der Hand, nämlich

$$\langle \tilde{v}_\alpha(t) | v_\beta \rangle \rightarrow \delta_{\alpha\beta} \beta N \langle v_\alpha e^{-t/\tau} v_\alpha \rangle_0, \quad (2.134)$$

wobei die Geschwindigkeiten verschiedener Teilchen unkorreliert sind und im thermischen Gleichgewicht

$$\beta \langle v_\alpha v_\alpha \rangle_0 = \frac{1}{k_B T} \frac{k_B T}{m} \quad (2.135)$$

nach dem Gleichverteilungssatz. Dann wird

$$\langle \tilde{v}_\alpha(t) | v_\beta \rangle \rightarrow \delta_{\alpha\beta} e^{-t/\tau} \frac{N}{m}, \quad (2.136)$$

und durch Fouriertransformation erhält man die Drude-Formel mit $n = N/V$, wobei alle Diagonalelemente des Leitfähigkeitstensors gleich sind.

2.4.5 Wechselwirkungsfreie Fermionen

Für wechselwirkungsfreie Fermionen läßt sich ein Ausdruck für den Leitfähigkeitstensor herleiten, der direkt weiter berechnet werden kann. Hierfür gehen wir nochmal auf die Definition der dynamischen Suszeptibilität Gl. (2.8) zurück,

$$\chi_{AB}(t) \equiv i \text{Tr} \left(\rho_0 [\tilde{A}(t), B] \right) \theta(t), \quad (2.137)$$

den wir jetzt in zweiter Quantisierung für *Einteilchenoperatoren* (SKRIPT QUANTENMECHANIK II)

$$A = \sum_{nm} \langle n|A|m\rangle c_n^\dagger c_m, \quad B = \sum_{kl} \langle k|B|l\rangle c_k^\dagger c_l \quad (2.138)$$

auswerten. Hierbei ist

$$[\tilde{A}(t), B] = \sum_{nmkl} \langle n|A|m\rangle \langle k|B|l\rangle e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} [c_n^\dagger c_m, c_k^\dagger c_l], \quad (2.139)$$

wobei wir die Zeitentwicklung der Operatoren $\tilde{c}_m(t) = e^{-i\varepsilon_m t}$ etc. mit den Einteilchenenergien ε_m benutzen. Weiterhin gilt (NACHRECHNEN)

$$[c_\alpha^\dagger c_\beta, c_\gamma^\dagger c_\delta] = c_\alpha^\dagger c_\delta \delta_{\beta\gamma} - c_\gamma^\dagger c_\beta \delta_{\alpha\delta}, \quad (2.140)$$

und mit

$$\text{Tr}(\rho_0 c_n^\dagger c_m) = \delta_{nm} f_n, \quad f_n \equiv \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} + 1}, \quad \text{Fermifunktion} \quad (2.141)$$

folgt dann

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(t) &= i \sum_{nmkl} \langle n|A|m\rangle \langle k|B|l\rangle e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} \delta_{nl} \delta_{mk} (f_n - f_m) \\ &= i \sum_{nm} \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} (f_n - f_m). \end{aligned} \quad (2.142)$$

Durch Fourier-Trafo folgt

$$\tilde{\chi}_{AB}(z) = \int_0^\infty dt e^{izt} \chi_{AB}(t) = \sum_{nm} \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle \frac{f_n - f_m}{\varepsilon_m - \varepsilon_n - z}. \quad (2.143)$$

Wir benutzen das zur Berechnung des Realteils des Leitfähigkeitstensors $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$, Gl. (2.100),

$$\Re \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{e^2}{V} \frac{\Im \tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)}{\omega}. \quad (2.144)$$

Hierbei ist $\Im \tilde{\chi} \equiv \chi''$ mit den Matrixelementen der paramagnetischen Stromdichteoperatoren auszuwerten, d.h. $A = \mathbf{j}(\mathbf{x})$ und $B = \mathbf{j}(\mathbf{x}')$, und wir erhalten

$$\Re \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{\pi e^2}{V} \sum_{nm} \langle n|j_\alpha(\mathbf{x})|m\rangle \langle m|j_\beta(\mathbf{x}')|n\rangle \frac{f_n - f_m}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n - \omega). \quad (2.145)$$

2.5 Die Gedächtnis-Funktion

Die Form

$$\tilde{\Phi}(\omega) = -i \frac{\chi^{\text{th}}}{-i\tau^{-1} - \omega}, \quad \chi^{\text{th}} = \frac{N}{m} \quad (2.146)$$

legt einen allgemeinen Ansatz

$$\tilde{\Phi}(z) = -i \frac{\chi^{\text{th}}}{N(z) - z}, \quad \text{Gedächtnis-Funktion } N(z) \quad (2.147)$$

nahe. Hierbei hofft man, die Gedächtnis-Funktion $N(z)$ einfacher als die gesamte Relationsfunktion direkt berechnen zu können.

Wir formen das etwas um;

$$\tilde{\Phi}(z) = -i \frac{\chi^{\text{th}}}{N(z) - z} = \frac{\tilde{\chi}(z) - \chi^{\text{th}}}{iz} \quad (2.148)$$

$$\rightsquigarrow \tilde{\chi}(z) = \frac{-N(z)\chi^{\text{th}}}{-N(z) + z} = \frac{-N(z)\chi^{\text{th}}}{z} \left(1 - \frac{-N(z)}{z^2} + \dots \right), \quad (2.149)$$

wobei wir hier eine Potenzreihenentwicklung in der Gedächtnis-Funktion $N(z)$ angesetzt haben, die wir im Folgenden im Sinne einer Störungstheorie als ‘klein’ ansehen wollen, motiviert durch die Identifikation

$$N(z) \sim -i\tau^{-1} \quad (2.150)$$

mit der Rate in der Drude-Formel, die wiederum (im Gegensatz zur Zeit τ) störungstheoretisch berechnet werden kann (z.B. durch Fermis Goldene Regel). In niedrigster Ordnung in $N(z)$ haben wir also ¹

$$z\tilde{\chi}(z) \approx -N(z)\chi^{\text{th}}. \quad (2.151)$$

2.5.1 Bewegungsgleichungen

Bewegungsgleichungen für Heisenbergoperatoren $A(t) \equiv e^{iHt} A e^{-iHt}$, B :

$$\begin{aligned} \langle\langle A; B \rangle\rangle &\equiv \tilde{\chi}_{AB}(z) = i \int_0^\infty dt e^{izt} \langle [A(t), B] \rangle_0 \\ &= \frac{-i}{iz} \langle [A, B] \rangle_0 - i \int_0^\infty dt \frac{1}{iz} e^{izt} \frac{d}{dt} \langle [A(t), B] \rangle_0 \\ &= \frac{-1}{z} \langle [A, B] \rangle_0 - \frac{1}{z} \int_0^\infty dt e^{izt} i \langle [[H, A](t), B] \rangle_0 \\ \rightsquigarrow z \langle\langle A; B \rangle\rangle &= -\langle [A, B] \rangle_0 - \langle\langle [H, A]; B \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (2.152)$$

¹ W. Götze und P. Wölfle, Phys. Rev. B **6**, 1226 (1972).

Alternativ ist

$$\begin{aligned}
\langle\langle A; B \rangle\rangle &\equiv \tilde{\chi}_{AB}(z) = i \int_0^\infty dt e^{izt} \langle [A, B(-t)] \rangle_0 \\
&= \frac{-i}{iz} \langle [A, B] \rangle_0 - i \int_0^\infty dt \frac{1}{iz} e^{izt} \frac{d}{dt} \langle [A, B(-t)] \rangle_0 \\
&= \frac{-1}{z} \langle [A, B] \rangle_0 - \frac{1}{z} \int_0^\infty dt e^{izt} (-i) \langle [A, [H, B](-t)] \rangle_0 \\
\rightsquigarrow z \langle\langle A; B \rangle\rangle &= -\langle [A, B] \rangle_0 + \langle\langle A; [H, B] \rangle\rangle. \tag{2.153}
\end{aligned}$$

Eine zweite Anwendung liefert

$$z \langle\langle [H, A]; A \rangle\rangle = -\langle [[H, A], A] \rangle_0 + \langle\langle [H, A]; [H, A] \rangle\rangle \tag{2.154}$$

Damit hat man dann z.B.

$$z \langle\langle A; A \rangle\rangle \equiv z \tilde{\chi}_{AA}(z) = -\langle\langle [H, A]; A \rangle\rangle = -\frac{\langle\langle [H, A]; [H, A] \rangle\rangle - \langle [[H, A], A] \rangle_0}{z} \tag{2.155}$$

2.5.2 Gedächtnis-Funktion für Streuung an statischen Potentialen

Wir verwenden das nun, um die Gedächtnisfunktion

$$N(z) \approx -z \tilde{\chi}(z) / \chi^{\text{th}} \tag{2.156}$$

in Störungstheorie bezüglich eines Streu-Potentials V zu berechnen, um daraus die Rate

$$\tau^{-1} = -\Im N(\omega = 0) \equiv -N''(0) \tag{2.157}$$

zu erhalten. Hierbei ist

$$H = H_0 + V, \quad H_0 \equiv \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad V \equiv \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} \tag{2.158}$$

ein Modell für freie Fermionen (H_0), die an einem statischen Störpotential streuen. Wir benutzen weiterhin

$$A = \sum_{\mathbf{k}\sigma} v(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \tag{2.159}$$

als Operator für eine Geschwindigkeitskomponente $v(\mathbf{k})$ (z.B. die x -Komponente), wobei \mathbf{k} der Wellenvektor ist.

1. AUFGABE: Wir berechnen die Drude-Leitfähigkeit

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega}. \tag{2.160}$$

a) Wieso kann man nicht erwarten, die Streurrate τ^{-1} (z.B. für Streuung an Störstellen) durch eine direkte Störungsrechnung für $\sigma(\omega)$ zu erhalten?

- b) Wir berechnen deshalb $\sigma(\omega) = \frac{e^2}{V} \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega)$ mit Hilfe der über $\tilde{\Phi}(z) = -i \frac{\chi^{\text{th}}}{N(z)-z}$ definierten Gedächtnisfunktion $N(z)$, wobei $\tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(\omega)$ die Relaxationsfunktion der Geschwindigkeit ist. Hierzu approximieren wir $N(z) \approx -z\tilde{\chi}(z)/\chi^{\text{th}}$ wie oben ausgeführt, wobei $\tilde{\chi}(z)$ der retardierte Korrelator einer Geschwindigkeitskomponente $\sum_{\mathbf{k}\sigma} v(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ für den Modell-Hamiltonian Gl. (2.158) in zweiter Ordnung Störungstheorie in V ist. Zeige hierzu, dass $[H, A] = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(v(\mathbf{k}') - v(\mathbf{k}))c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}$.
- c) Berechne den Imaginärteil $\Im N(\omega) \equiv N''(\omega)$. In zweiter Ordnung Störungstheorie in V können hierzu Fermifunktionen $f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen der $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}$ angenommen werden. Zeige, dass

$$N''(\omega) = -\frac{\pi m}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(v(\mathbf{k}') - v(\mathbf{k}))|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}'})] \frac{1}{\omega}. \quad (2.161)$$

und damit bei Temperaturen $k_B T \ll E_F$ und Frequenzen $\omega \ll E_F$

$$\tau^{-1} = -N''(0) = \frac{\pi m}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(v(\mathbf{k}') - v(\mathbf{k}))|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta(E_F - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (2.162)$$

- d) Interpretiere das Ergebnis für τ^{-1} durch Übergangsraten

$$W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') \equiv 2\pi |V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.163)$$

im Sinne von Fermis Goldener Regel. Weiterhin soll angenommen werden, dass durch eine weitere Mittelung über das Potential V (das z.B. durch Unordnung erzeugt wird) das Ergebnis für τ^{-1} nur vom Betrag des *Impulsübertrags* $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ abhängt, so dass man z.B. in $d = 3$ Dimensionen

$$(v(\mathbf{k}') - v(\mathbf{k}))^2 \rightarrow \frac{1}{3m^2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \quad (2.164)$$

ersetzen darf. Schreibe somit τ^{-1} mit Hilfe der \mathbf{k} -abhängigen *Transportrate*

$$\tau_{\mathbf{k}}^{-1} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') (1 - \cos \theta). \quad (2.165)$$

Welche Bedeutung hat der Winkel θ ?

2. AUFGABE (Projekt): Berechnung der Drude-Leitfähigkeit mit der Boltzmann-Gleichung.
3. AUFGABE: Herleitung der Landauer-Büttiker-Formel aus der Kubo-Formel.

3. GREENSCHE FUNKTIONEN FÜR DAS NICHTGLEICHGEWICHT

(HAUG/JAUHO; LANDAU/LIFSHITZ Vol. 10; Skript 'Quantenmechanik der Vielteilchensysteme', Vorlesung WS 1999/2000 Uni Hamburg (TB)).

3.1 Einführung

Wir betrachten einen zeitabhängigen Hamiltonian mit 'Einschaltzeit' t_0 ,

$$H(t) \equiv h + H'(t), \quad h \equiv H_0 + V, \quad H'(t) = 0, \quad \text{für } t < t_0 \quad (3.1)$$

und thermischem Anfangszustand

$$\rho(t_0) = \frac{e^{-\beta h}}{\text{Tr} e^{-\beta h}}. \quad (3.2)$$

Ziel ist zunächst die Berechnung von Erwartungswerten von Observablen O zur Zeit $t \geq t_0$,

$$\langle O \rangle_t \equiv \text{Tr} \rho(t_0) O_H(t), \quad O_H(t) \equiv U^\dagger(t, t_0) O U(t, t_0), \quad U(t, t_0) = T e^{-i \int_{t_0}^t dt' H(t')}, \quad (3.3)$$

wobei T der *Zeitordnungsoperator* ist, mit dem formal die Differentialgleichung für den Zeitentwicklungsoperator (Propagator)

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0), \quad U(t_0, t_0) = 1 \quad (3.4)$$

gelöst wird. Der Operator $O_H(t)$ bezieht sich also auf das Heisenbergbild. Für Operatoren $A(t)$ im Schrödingerbild, die auch explizit zeitabhängig sein dürfen, definieren wir eine Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild

$$\tilde{A}(t) \equiv e^{ih(t-t_0)} A(t) e^{-ih(t-t_0)} \quad (3.5)$$

Dann gilt (NACHRECHNEN)

$$O_H(t) = v^\dagger(t, t_0) \tilde{O}(t) v(t, t_0) \quad (3.6)$$

$$U(t, t_0) = e^{-ih(t-t_0)} v(t, t_0), \quad v(t, t_0) = T e^{-i \int_{t_0}^t dt' \tilde{H}'(t')}. \quad (3.7)$$

Hierbei ist $v(t, t_0)$ der 'nichttriviale' Anteil des Zeitentwicklungsoperators, der nur vom zeitabhängigen Anteil $H'(t')$ des Hamiltonians abhängt.

3.1.1 Die Zeitkontur

In $v(t, t_0)$ läuft die Zeit von t_0 nach t , während sie im adjungierten $v^\dagger(t, t_0)$ von t nach t_0 läuft, d.h. wieder (unitär) zurück. Wir führen nun das Konzept der *Zeitkontur* als einen ‘Integrationsweg’ von $t_0 \rightarrow t$ und wieder zurück von $t \rightarrow t_0$ auf der reellen Zeitachse t' ein (SKIZZE), wobei die Kontur \mathcal{C}_t (für t_0 fest) zur Unterscheidung den Hinweg ‘knapp oberhalb’ und den Rückweg ‘knapp unterhalb’ der Zeitachse ansetzt. Auf dieser Kontur (d.h. der Kurve von $t_0 \rightarrow t \rightarrow t_0$) wird jetzt eine formale Konturintegration definiert;

$$O_H(t) = T_{\mathcal{C}_t} \exp \left(-i \int_{\mathcal{C}_t} d\tau \tilde{H}'(\tau) \right) \tilde{O}(t) \quad (3.8)$$

$$T_{\mathcal{C}_t} \quad , \quad \text{ordnet auf } \mathcal{C}_t \text{ spätere Operatoren links von früheren.} \quad (3.9)$$

Zum Merken: ‘Alter vor Schönheit’; ‘late goes left’, ‘Spätlinke’. Der Beweis von Gl. (3.8) (HAUG/JAUHO) beginnt mit der formalen Reihenentwicklung

$$T_{\mathcal{C}_t} \exp \left(-i \int_{\mathcal{C}_t} d\tau \tilde{H}'(\tau) \right) \tilde{O}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{\mathcal{C}_t} d\tau_1 \dots \int_{\mathcal{C}_t} d\tau_n T_{\mathcal{C}_t} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \dots \tilde{H}'(\tau_n) \tilde{O}(t) \right) \quad (3.10)$$

und benutzt eine kombinatorische Überlegung zur Zerlegung der Konturintegration

$$T_{\mathcal{C}_t} \dots = \int_{\rightarrow} \dots + \int_{\leftarrow} \dots \equiv \int_{t_0}^t \dots + \int_t^{t_0} \dots \quad (3.11)$$

Ein Term n -ter Ordnung in der Reihenentwicklung besteht aus 2^n solcher \int_{\rightarrow} bzw. \int_{\leftarrow} -Integrationen, z.B.

$$\int_{\leftarrow} d\tau_3 \dots \int_{\leftarrow} d\tau_n T_{\leftarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_3) \dots \tilde{H}'(\tau_n) \tilde{O}(t) \right) \int_{\rightarrow} d\tau_1 \int_{\rightarrow} d\tau_2 T_{\rightarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \tilde{H}'(\tau_2) \right) \quad (3.12)$$

mit den Zeitordnungssymbolen T_{\rightarrow} auf dem Hin-Ast und T_{\leftarrow} auf dem Rück-Ast. In den Integralen sind also n ‘Plätze’ entweder mit \rightarrow oder \leftarrow besetzt. Insgesamt gibt es 2^n Anordnungen. Die Anzahl der Anordnungen mit $0 \leq m \leq n$ Plätzen mit \rightarrow ist dann

$$\frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-(m-1))}{m!} = \binom{n}{m}, \quad (3.13)$$

wobei $m!$ im Nenner die Anzahl der Umtauschmöglichkeiten innerhalb der \rightarrow ist, da nicht interessiert, wer der 1-te, 2-te, ... m -te ist. Insgesamt also $\sum_{m=0}^n \binom{n}{m} = (1+1)^n = 2^n$, wie es sein muss. Die $\binom{n}{m}$ Terme mit jeweils m T_{\rightarrow} -Integralen liefern alle dasselbe

(Umbenennung von Integrationsvariablen). Deshalb gilt

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathcal{C}_t} d\tau_1 \dots \int_{\mathcal{C}_t} d\tau_n T_{\mathcal{C}_t} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \dots \tilde{H}'(\tau_n) \tilde{O}(t) \right) \tag{3.14} \\
&= \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \int_{\leftarrow} d\tau_{m+1} \dots d\tau_n T_{\leftarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_{m+1}) \dots \tilde{H}'(\tau_n) \right) \tilde{O}(t) \int_{\rightarrow} d\tau_1 \dots d\tau_m T_{\rightarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \dots \tilde{H}'(\tau_m) \right) \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n!}{m!k!} \delta_{n,k+m} \int_{\leftarrow} d\tau'_1 \dots d\tau'_k T_{\leftarrow} \left(\tilde{H}'(\tau'_1) \dots \tilde{H}'(\tau'_k) \right) \tilde{O}(t) \int_{\rightarrow} d\tau_1 \dots d\tau_m T_{\rightarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \dots \tilde{H}'(\tau_m) \right), \tag{3.15}
\end{aligned}$$

wobei wir mit dem Kronecker-Delta $k = n - m$ als neuen Index einführen können und die Summen über die positiven ganzen Zahlen so bis nach Unendlich ausdehnen. Summation dieses Ausdrucks über $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \dots$ ergibt dann

$$\begin{aligned}
& T_{\mathcal{C}_t} \exp \left(-i \int_{\mathcal{C}_t} d\tau \tilde{H}'(\tau) \right) \tilde{O}(t) \tag{3.16} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \int_{\leftarrow} d\tau'_1 \dots d\tau'_k T_{\leftarrow} \left(\tilde{H}'(\tau'_1) \dots \tilde{H}'(\tau'_k) \right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} \tilde{O}(t) \int_{\rightarrow} d\tau_1 \dots d\tau_m T_{\rightarrow} \left(\tilde{H}'(\tau_1) \dots \tilde{H}'(\tau_m) \right) \\
&= v^\dagger(t, t_0) \tilde{O}(t) v(t, t_0) = O_H(t), \tag{3.17}
\end{aligned}$$

was zu beweisen war.

3.1.2 Die vier Greenschen Funktionen

Die im Folgenden zu entwickelnde formale Störungstheorie benutzt als zentrale Größe Korrelationsfunktionen von Feldoperatoren $\Psi_\sigma(\mathbf{x})$ für ein Teilchen mit Spinprojektion σ am Ort \mathbf{x} in zweiter Quantisierung im Heisenbergbild

$$\Psi_\sigma(\mathbf{x}, t) \equiv U^\dagger(t, t_0) \Psi_\sigma(\mathbf{x}) U(t, t_0) \tag{3.18}$$

(wir lassen hier den Index H an den Feldoperatoren weg. Mit der Abkürzung $(\sigma_1, \mathbf{x}_1, t_1) = 1$ etc. sind diese Korrelationsfunktionen

$$G(1, 1') \equiv -i \langle T_{\mathcal{C}} \Psi(1) \Psi^\dagger(1') \rangle \equiv -i \text{Tr} \left(\rho(t_0) T_{\mathcal{C}} \Psi(1) \Psi^\dagger(1') \right), \tag{3.19}$$

wobei festgelegt werden muss, auf welchem Teil der Kontur (oben oder unten) die Zeiten t_1 und t'_1 liegen. Dafür gibt es vier Möglichkeiten und dementsprechend *vier* Greensche Funktionen,

$$\begin{aligned}
G^{--}(1, 1') \equiv G_c(1, 1') &\equiv -i\langle T\Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle, \quad \text{kausale (zeitgeordnete) GF} \\
&\equiv -i\theta(t_1 - t'_1)\langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle \pm i\theta(t'_1 - t_1)\langle \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle \quad (3.20) \\
G^{++}(1, 1') \equiv G_{\tilde{c}}(1, 1') &\equiv -i\langle \tilde{T}\Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle, \quad \text{anti-zeitgeordnete GF} \\
&\equiv -i\theta(t'_1 - t_1)\langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle \pm i\theta(t_1 - t'_1)\langle \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle \quad (3.21) \\
G^{-+}(1, 1') \equiv G^<(1, 1') &\equiv \pm i\langle \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle, \quad \text{'G-kleiner'} \quad (3.22) \\
G^{+-}(1, 1') \equiv G^>(1, 1') &\equiv -i\langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \rangle, \quad \text{'G-größer'}. \quad (3.23)
\end{aligned}$$

Hierbei steht in \pm das obere Vorzeichen für fermionische und das untere Vorzeichen für bosonische Feldoperatoren (LANDAU-LIFSHITZ 10).

Die Indizes $--$ in $G^{--}(1, 1')$ bedeuten, dass sowohl das erste (t_1) als auch das zweite Zeitargument (t_1) auf dem oberen *Vorwärts-Zweig der Kontur* liegen, der mit $-$ gekennzeichnet wird. Entsprechend $-+$ in $G^<(1, 1')$: Das erste Zeitargument t_1 liegt auf dem Vorwärtszweig, während t'_1 auf dem *Rückwärtszweig der Kontur* liegt, der mit $+$ gekennzeichnet wird. Hier wird $t_1(\tau)$ also auf der Kontur früher als t'_1 angelaufen, ist also auf der Kontur gesehen kleiner als t'_1 . In $G^>(1, 1')$ liegt t_1 auf dem Rückwärtszweig und t'_1 auf dem Vorwärtszweig, ist also auf der Kontur größer als t'_1 . Schliesslich sind in $G^{++}(1, 1')$ beide Zeiten der Rückwärtskontur zugeordnet. Dann ist z.B. für 'echte' Zeiten $t_1 > t'_1$ die Reihenfolge auf der Rückwärtskontur umgedreht und der Feldoperator $\Psi^\dagger(1')$ steht links.

In allen Fällen steht derjenige Feldoperator mit der auf der Kontur späteren Zeit *links*.

Von den vier GF sind nur drei unabhängig voneinander, denn es gilt

$$G^{--} + G^{++} = G^{-+} + G^{+-}. \quad (3.24)$$

Wichtige Kombinationen sind die retardierten und avancierten GF;

$$\begin{aligned}
iG^r(1, 1') &= \theta(t_1 - t'_1)\langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \pm \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle, \quad \text{retardierte GF} \\
iG^a(1, 1') &= -\theta(t'_1 - t_1)\langle \Psi(1)\Psi^\dagger(1') \pm \Psi^\dagger(1')\Psi(1) \rangle, \quad \text{avancierte GF}. \quad (3.25)
\end{aligned}$$

Hier gilt

$$G^r - G^a = G^> - G^<. \quad (3.26)$$

3.2 Die Störungsreihe

Wir betrachten im Folgenden einen Hamiltonian

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad (3.27)$$

wobei H_0 im Sinne der zweiten Quantisierung ein Einteilchenoperator ist, d.h. keine Teilchen–Teilchen–Wechselwirkungen enthält. Weiterhin sei

$$\rho(t_0) = \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}}. \quad (3.28)$$

Wir schreiben die Zeitentwicklung der Heisenbergbild–Feldoperatoren als

$$\Psi(1) = v^\dagger(t_1, t_0) \tilde{\Psi}(1) v(t_1, t_0), \quad v(t_1, t_0) = T e^{-i \int_{t_0}^{t_1} dt' \tilde{H}'(t')}. \quad (3.29)$$

und damit

$$\Psi(1) \Psi^\dagger(1') = v^\dagger(t_1, t_0) \tilde{\Psi}(1) v(t_1, t_0) v^\dagger(t'_1, t_0) \tilde{\Psi}^\dagger(1') v(t'_1, t_0). \quad (3.30)$$

Für $t_1 > t'_1$ schreiben wir das um mittels

$$v(t_1, t_0) = v(t_1, t'_1) v(t'_1, t_0) \quad (3.31)$$

$$v^\dagger(t_1, t_0) = v^{-1}(t_1, t_0) = v^{-1}(\bar{t}_0, t_0) v(\bar{t}_0, t_0) v^{-1}(t_1, t_0) = v^{-1}(\bar{t}_0, t_0) v(\bar{t}_0, t_1) \quad (3.32)$$

wobei $t_0 \ll 0$ weit in der Vergangenheit und $\bar{t}_0 = -t_0$ weit in der Zukunft liegen sollen. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \Psi(1) \Psi^\dagger(1') &= v^{-1}(\bar{t}_0, t_0) \underbrace{v(\bar{t}_0, t_1) \tilde{\Psi}(1) v(t_1, t'_1) \tilde{\Psi}^\dagger(1') v(t'_1, t_0)}_{\text{zeitgeordnet}} \\ &= v^{-1}(\bar{t}_0, t_0) T \left[\tilde{\Psi}(1) \tilde{\Psi}^\dagger(1') v(\bar{t}_0, t_0) \right], \quad t_1 > t'_1. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Für $t_1 < t'_1$ kommt dasselbe heraus (NACHRECHNEN), und wir erhalten im Limes $t_0 = -\bar{t}_0 \rightarrow -\infty$ für die *kausale Greensche Funktion* den Ausdruck

$$G_c(1, 1') \equiv G^{--}(1, 1') = -i \langle S^{-1} T \left[\tilde{\Psi}(1) \tilde{\Psi}^\dagger(1') S \right] \rangle, \quad S \equiv T e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \tilde{H}'(t')}. \quad (3.34)$$

Hierbei ist S die uns schon in der QM II begegnete S –Matrix im Wechselwirkungsbild, und $\langle \rangle$ bezeichnet den Erwartungswert, der mit dem Dichteoperator ρ_0 gebildet wird. Gl. (3.34) ist der Ausgangspunkt der formalen Störungstheorie.

3.2.1 Wicksches Theorem und Diagramme

Um mit einem konkreten Beispiel zu beginnen, betrachten wir ein Einteilchenpotential $U(\mathbf{x}, t)$ als Störoperator für *Fermionen* in zweiter Quantisierung;

$$H'(t) = \int d\mathbf{x} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) U(\mathbf{x}, t) \Psi_{\sigma}(\mathbf{x}, t). \quad (3.35)$$

Für die kausale GF erhalten wir in erster Ordnung in U durch Entwickeln von S und S^{-1}

$$\begin{aligned} iG_c(1, 2) &= iG_c^{(0)}(1, 2) + \frac{-i}{1!} \int d\mathbf{x}_3 \sum_{\sigma_3} \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \langle T \left[\tilde{\Psi}(1) \tilde{\Psi}^\dagger(2) \tilde{\Psi}^\dagger(3) \tilde{\Psi}(3) \right] \rangle U(3) \\ &+ \frac{i}{1!} \int d\mathbf{x}_3 \sum_{\sigma_3} \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \langle \tilde{T} \left[\tilde{\Psi}^\dagger(3) \tilde{\Psi}(3) \right] T \left[\tilde{\Psi}(1) \tilde{\Psi}^\dagger(2) \right] \rangle U(3) \\ &+ O(U^2). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Für die Berechnung der Gleichgewichtserwartungswerte der Korrelationsfunktionen wie $\langle T [\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2)\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3)] \rangle$ benötigen wir das *Wicksche Theorem*

Satz 4 (Wicksches Theorem). *Sei $\rho_0 \propto e^{-\beta H_0}$ ein Gleichgewichtszustand mit einem Einteilchen-Hamiltonian H_0 (quadratisch in Erzeugern/Vernichtern). Dann lassen sich alle Erwartungswerte von Produkten von Feldoperatoren durch Summen von Erwartungswerten einfacher Zweier-Produkte (Kontraktionen) von Feldoperatoren ausdrücken.*

Der Beweis ist etwas umständlich und es ist anschaulicher, mit einem Beispiel zu beginnen:

$$\begin{aligned} \langle T [\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2)\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3)] \rangle &= \langle T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle \langle T\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3) \rangle \\ &\quad - \langle T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(3) \rangle \langle T\tilde{\Psi}^\dagger(2)\tilde{\Psi}(3) \rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Hier gibt es zwei Möglichkeiten, das Viererprodukt auf Zweierprodukte zu kontrahieren. Bei der zweiten Möglichkeit (zweite Zeile) sind $\tilde{\Psi}^\dagger(2)$ und $\tilde{\Psi}^\dagger(3)$ vertauscht worden, weshalb ein Minuszeichen dazukommt.

Das zweite Beispiel ist der ‘gemischte’ Term aus der Entwicklung von iG_c ;

$$\begin{aligned} \langle \tilde{T} [\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3)] T [\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2)] \rangle &= \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3) T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle \\ &= \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3) \rangle \langle T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle - \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(1) \rangle \langle \tilde{\Psi}(3)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle, \end{aligned} \quad (3.38)$$

wobei hier das letzte Produkt mit dem Minuszeichen davor aus der Fallunterscheidung $t_1 > t_2$, $t_1 \leq t_2$ herrührt und die \tilde{T} im ersten Produkt weggelassen werden kann, da die zwei Zeitargumente gleich sind. Jetzt sehen wir aber, dass sich in der Differenz

$$\begin{aligned} &\langle T [\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2)\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3)] \rangle - \langle \tilde{T} [\tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3)] T [\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(2)] \rangle \\ &= -\langle T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(3) \rangle \langle T\tilde{\Psi}^\dagger(2)\tilde{\Psi}(3) \rangle + \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(1) \rangle \langle \tilde{\Psi}(3)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle \\ &= \langle T\tilde{\Psi}(1)\tilde{\Psi}^\dagger(3) \rangle \langle T\tilde{\Psi}(3)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle + \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(1) \rangle \langle \tilde{\Psi}(3)\tilde{\Psi}^\dagger(2) \rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

gerade die Beiträge der jeweils ersten Kontraktionen wegheben, d.h. die Terme $\propto \langle \tilde{\Psi}^\dagger(3)\tilde{\Psi}(3) \rangle$, die in den gleich angegebenen Diagrammen gerade den *nicht zusammenhängenden Diagrammen* entsprechen. Dieses Wegheben von Termen ist ein wichtiges Merkmal der hier entwickelten Störungstheorie für die Greensche Funktion, wo nur *zusammenhängende Diagramme* beitragen.

Wir fassen unser Ergebnis zusammen;

$$\begin{aligned} iG_c^{(1)}(1,2) &= \int d\mathbf{x}_3 \sum_{\sigma_3} \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \left(\begin{aligned} &[-iU(3)][iG_c(1,3)^{(0)}][iG_c(3,2)^{(0)}] \\ &+ [iU(3)][iG_{<}(1,3)^{(0)}][iG_{>}(3,2)^{(0)}] \end{aligned} \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

An dieser Stelle führen wir eine *diagrammatische Schreibweise* der Störungstheorie ein.

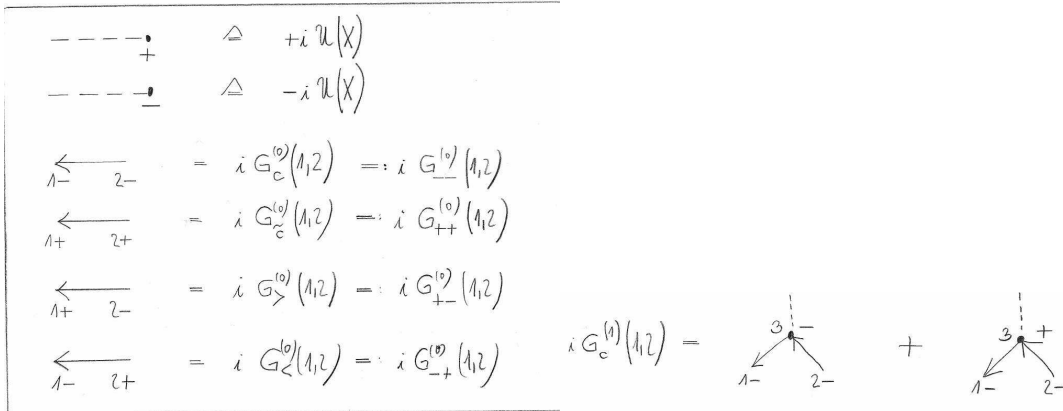


Fig. 3.1: LINKS: Diagramme für $G^{(0)}$ und Störpotential U . RECHTS: Diagramme für die erste Korrektur $iG_c^{(1)}(1,2)$ der GF.

3.2.2 Tunnel-Hamiltonian

Wir betrachten ein weiteres Beispiel, nämlich ein einzelnes Energieniveau ε_0 ('Quantendot'), das an eine Umgebung ('Bad') gekoppelt ist, die aus mehreren unabhängigen fermionischen Reservoiren (mit dem Index α) besteht. Der Hamiltonian ist

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} + \hat{\mathcal{H}}_d \quad (3.41)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_d \equiv \varepsilon_0 d^\dagger d, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} \equiv \sum_{k\alpha} \varepsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}, \quad \hat{\mathcal{V}} \equiv \sum_{k\alpha} \left(V_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger d + V_{k\alpha}^* d^\dagger c_{k\alpha} \right). \quad (3.42)$$

Das Matrixelement $V_{k\alpha}$ modelliert die Amplitude für das Tunneln zwischen dem Dot und der Umgebung. Die Operatoren vom Dot und den einzelnen Reservoiren sollen auf verschiedenen Hilberträumen operieren und miteinander vertauschen. Der Spinindex für die Fermionen ist in diesem Modell hier weggelassen - wir können uns z.B. vorstellen, dass alle Fermionen spinpolarisiert sind mit einer festen Spinrichtung, z.B. \uparrow bei Spin $\frac{1}{2}$.

Wir wollen zunächst wieder eine Störungstheorie für die kausale GF

$$iG_{--}(t, t') \equiv \langle T d(t) d^\dagger(t') \rangle_0 \quad (3.43)$$

aufstellen. Der Anfangszustand bei $t_0 \rightarrow -\infty$ sei thermisch, $\rho(t_0) \propto e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0}$. In diesem Anfangszustand sind Dot und Umgebung voneinander isoliert.

Der Wechselwirkungsterm ('Tunnel-Hamiltonian') $\hat{\mathcal{V}}$ ist jetzt eine Summe aus mehreren Termen. Für die kausale GF erhalten wir in erster Ordnung in $\hat{\mathcal{V}}$ durch Entwickeln von S und S^{-1}

$$iG_{--}(t_1, t_2) = iG_{--}^{(0)}(t_1, t_2) \quad (3.44)$$

$$+ \frac{-i}{1!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \sum_{k\alpha} \left(V_{k\alpha} \langle T \tilde{d}(t_1) \tilde{d}^\dagger(t_2) \tilde{c}_{k\alpha}^\dagger(t_3) \tilde{d}(t_3) \rangle + V_{k\alpha}^* \langle T \tilde{d}(t_1) \tilde{d}^\dagger(t_2) \tilde{d}^\dagger(t_3) \tilde{c}_{k\alpha}(t_3) \rangle \right) \quad (3.45)$$

+ , Terme aus der Entwicklung von S^{-1} .

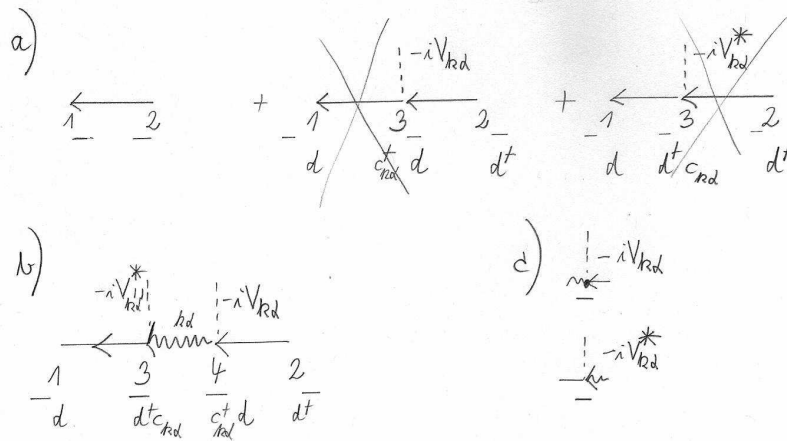


Fig. 3.2: Ein-Niveau- (Tunnel-) Hamiltonian. a) Terme erster Ordnung geben Null, da die ‘gemischten’ freien GF verschwinden. b) Ein Diagramm zur ersten Iteration für $iG_{--}(1,2)$. Es gibt noch drei weitere Diagramme, wo am Selbstenergieanteil (an den Stellen 3 und 4) die Keldysh-Indizes $-+, +-,$ und $++$ stehen. c) Definition der ‘Vertizes’ für das Tunnelmatrixelement auf dem $-$ Zweig. Auf dem $+$ Zweig ist das Vorzeichen $+$ statt $-$.

Tatsächlich liefern alle Terme erster Ordnung bei der Anwendung des Wickschen Theorems Null. Es ist z.B.

$$(-iV_{k\alpha})\langle T\tilde{d}(t_1)\tilde{c}_{k\alpha}^\dagger(t_3)\rangle\langle T\tilde{d}(t_3)\tilde{d}^\dagger(t_2)\rangle = 0, \quad (3.46)$$

denn im Anfangszustand gibt es keine Korrelationen zwischen dem Dot und seiner Umgebung und der erste Faktor verschwindet (SKIZZE). Entsprechend ist

$$(-iV_{k\alpha})^*\langle T\tilde{d}(t_1)\tilde{d}^\dagger(t_3)\rangle\langle T\tilde{c}_{k\alpha}(t_3)\tilde{d}^\dagger(t_2)\rangle = 0. \quad (3.47)$$

Die ersten nichtverschwindenden Terme treten in zweiter Ordnung Störungstheorie auf. Hier werden die Diagramme praktisch unerlässlich (SKIZZE). Wir schreiben

$$iG(1,2) = iG^{(0)}(1,2) + \int dt_3 dt_4 iG^{(0)}(1,4) (-i\Sigma(4,3)) iG^{(0)}(3,2). \quad (3.48)$$

Hierin ist $\Sigma(4,3)$ die *Selbstenergie* (s.u.), die wegen der vier Anschlußmöglichkeiten \pm eine 2×2 -Matrix ist. Wir erhalten die Selbstenergie durch Multiplikation der Matrizen zum ‘linken Anschluss’ V^* , zur freien Propagation $g_{k\alpha}$ in der Umgebung (geschlängelte GF in der Abbildung), und zum rechten Anschluss V (SKIZZE), und anschließende Summation über $k\alpha$.

Dass das wirklich so einfach funktioniert, muss man zumindest für die einfachsten Terme direkt nachrechnen. Daraus ergibt sich die Einsicht in einfache *Diagrammregeln*. Hier haben wir also konkret

$$-i\Sigma(t_3, t_4) = \sum_{k\alpha} (i\hat{V}_{k\alpha}^*) i g_{k\alpha}(t_3, t_4) (i\hat{V}_{k\alpha}) \quad (3.49)$$

mit den Matrizen

$$\hat{V}_{k\alpha}^* \equiv \begin{pmatrix} -V_{k\alpha}^* & 0 \\ 0 & V_{k\alpha}^* \end{pmatrix}, \quad \hat{V}_{k\alpha} \equiv \begin{pmatrix} -V_{k\alpha} & 0 \\ 0 & V_{k\alpha} \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

$$g_{k\alpha} \equiv \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & g_{k\alpha}^{-+} \\ g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix}, \quad \Sigma \equiv \begin{pmatrix} \Sigma^{--} & \Sigma^{-+} \\ \Sigma^{+-} & \Sigma^{++} \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

3.2.3 Freie fermionische GF

Die freien GF der Umgebung sind die fermionischen α -Reservoir GF

$$g_{k\alpha}^{--}(t, t') \equiv -i \langle T c_{k\alpha}(t) c_{k\alpha}^\dagger(t') \rangle_0 \quad (3.52)$$

$$g_{k\alpha}^{-+}(t, t') \equiv i \langle c_{k\alpha}^\dagger(t') c_{k\alpha}(t) \rangle_0 \quad (3.53)$$

$$g_{k\alpha}^{+-}(t, t') \equiv -i \langle c_{k\alpha}(t) c_{k\alpha}^\dagger(t') \rangle_0 \quad (3.54)$$

$$g_{k\alpha}^{++}(t, t') \equiv -i \langle \tilde{T} c_{k\alpha}(t) c_{k\alpha}^\dagger(t') \rangle_0. \quad (3.55)$$

Da sich diese GF auf das Gleichgewicht beziehen, hängen sie nur von der Differenz der Zeitargument ab und es gibt keine Mischterme wie $-i \langle T c_{k\alpha}(t) c_{k'\alpha'}^\dagger(t') \rangle_0$. Die Fouriertransformation ist dann definiert als

$$g_{k\alpha}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} g_{k\alpha}(t, 0). \quad (3.56)$$

Das ergibt für die $<$, $>$ -Komponenten

$$g_{k\alpha}^{-+}(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-i\varepsilon_{k\alpha} t} f_{k\alpha} = 2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}) f_{k\alpha} \quad (3.57)$$

$$g_{k\alpha}^{+-}(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-i\varepsilon_{k\alpha} t} (1 - f_{k\alpha}) = -2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}) (1 - f_{k\alpha}) \quad (3.58)$$

$$f_{k\alpha} = \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \rangle_0 \quad (3.59)$$

mit den Fermifunktionen $f_{k\alpha}$. Statt g^{--} und g^{++} direkt zu berechnen, nehmen wir zuerst die retardierten/avancierten

$$g_{k\alpha}^r(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} (-i)\theta(t) e^{-i\varepsilon_{k\alpha} t} \langle \{c_{k\alpha}, c_{k\alpha}^\dagger\} \rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k\alpha} + i0^+} \quad (3.60)$$

$$g_{k\alpha}^a(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} i\theta(-t) e^{-i\varepsilon_{k\alpha} t} \langle \{c_{k\alpha}, c_{k\alpha}^\dagger\} \rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k\alpha} - i0^+}. \quad (3.61)$$

Dieses sind Fouriertrafos im Distributions-Sinn, die $\pm i0^+$ sind 'Konvergenz-erzeugende' Faktoren, damit die Stufenfunktion bei der Fourierrücktrafo entsteht.

AUFGABE: Überprüfe die Ergebnisse für g^r und g^a durch Fourierrücktrafo mit Hilfe von Integration in der komplexen Ebene.

Jetzt benutzen wir schließlich den allgemeinen Zusammenhang

$$G^{--} = G^r + G^{-+}, \quad G^{++} = -G^a + G^{-+} \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned}
\overleftarrow{\leftarrow}_{-} &= \overleftarrow{\leftarrow}_{-} + \overleftarrow{\leftarrow}_{-} \circlearrowleft + \overleftarrow{\leftarrow}_{-} \circlearrowright + \overleftarrow{\leftarrow}_{-} \circlearrowleft \circlearrowright + \overleftarrow{\leftarrow}_{-} \circlearrowright \circlearrowleft \\
\overleftarrow{\leftarrow}_{+} &= \overleftarrow{\leftarrow}_{+} + \overleftarrow{\leftarrow}_{+} \circlearrowleft + \overleftarrow{\leftarrow}_{+} \circlearrowright + \overleftarrow{\leftarrow}_{+} \circlearrowleft \circlearrowright + \overleftarrow{\leftarrow}_{+} \circlearrowright \circlearrowleft
\end{aligned}$$

Fig. 3.3: Definition der Selbstenergie am Beispiel der G_{--} und G_{++} .

zur Berechnung von

$$g_{k\alpha}^{--}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k\alpha} + i0^+} + 2\pi i f_{k\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}) \quad (3.63)$$

$$g_{k\alpha}^{++}(\omega) = -\frac{1}{\omega - \varepsilon_{k\alpha} - i0^+} + 2\pi i f_{k\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}). \quad (3.64)$$

3.2.4 Die Selbstenergie

In der Störungstheorie werden nun in höherer Ordnung bestimmte Diagramme zu Blöcken zusammengefaßt, wodurch sich *unendliche Partialsummationen* durchführen lassen. Für die Greensche Funktion ergibt sich daraus das Konzept der Selbstenergie, das wir hier diagrammatisch einführen (ABBILDUNG). Gemäß den vier Anschlußmöglichkeiten an die vier GF gibt es vier Selbstenergien Σ_{--} etc. Die unendlichen Partialsummationen lassen sich dann mit 2×2 -Matrizen G bzw. Σ als Integralgleichung zusammenfassen;

$$G(1, 2) = G^{(0)}(1, 2) + \int dX_3 dX_4 \sum_{\sigma_3 \sigma_4} G^{(0)}(1, 4) \Sigma(4, 3) G(3, 2). \quad (3.65)$$

Hierbei ist G die volle und $G^{(0)}$ die ungestörte (sich auf H_0 beziehende) GF;

$$G(1, 2) \equiv \begin{pmatrix} G_{--}(1, 2) & G_{-+}(1, 2) \\ G_{+-}(1, 2) & G_{++}(1, 2) \end{pmatrix}, \quad \Sigma(1, 2) \equiv \begin{pmatrix} \Sigma_{--}(1, 2) & \Sigma_{-+}(1, 2) \\ \Sigma_{+-}(1, 2) & \Sigma_{++}(1, 2) \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Für die *retardierte* GF vereinfacht sich diese 2×2 -Gleichung zu einer Gleichung direkt für die retardierten Komponenten (AUFGABE bzw. NACHRECHNEN);

$$\begin{aligned}
G_r(1, 2) &= G_r^{(0)}(1, 2) + \int dX_3 dX_4 \sum_{\sigma_3 \sigma_4} G_r^{(0)}(1, 4) \Sigma_r(4, 3) G_r(3, 2) \\
\Sigma_r &\equiv \Sigma_{<} + \Sigma_c \equiv \Sigma_{-+} + \Sigma_{--}, \quad \text{retardierte Selbstenergie.} \quad (3.67)
\end{aligned}$$

Diese Gleichung ist wichtig, wenn man z.B. den Zerfall von (retardierten) Korrelationsfunktionen berechnen möchte. Die Zerfallsrate hängt dann (in niedrigster Ordnung Störungstheorie) direkt mit der retardierten Selbstenergie Σ_r zusammen.

3.2.5 Beispiel: Ein-Niveau-Modell

Für das Beispiel unseres Tunnel-Hamiltonians Gl. (3.41) ist die Selbstenergie zur GF $G(1, 2)$ des Dots bereits durch den Ausdruck Gl. (3.49) bestimmt. Das sieht man am

einfachsten diagrammatisch (SKIZZE): es gibt einfach keine anderen Möglichkeiten, die volle GF für den Dot zusammenzubauen.

Besonders einfach wird jetzt die Gleichung Gl. (3.67) für die retardierte GF, die ja keine Matrixgleichung mehr ist;

$$G_r(t_1, t_2) = G_r^{(0)}(t_1, t_2) + \int dt_3 dt_4 G_r^{(0)}(t_1, t_4) \Sigma_r(t_4, t_3) G_r(t_3, t_2). \quad (3.68)$$

Hierin sind $G_r^{(0)}(t_1, t_4)$ und $\Sigma_r(t_4, t_3)$ nur Funktionen der Zeitdifferenzen. Wegen der Iteration in der Integralgleichung gilt das dann auch für $G_r(t_1, t_2)$. Explizit setzen wir also $t_2 = 0$ und Fourier-transformieren nach t_1 ;

$$\begin{aligned} G_r(\omega) &= G_r^{(0)}(\omega) \quad (3.69) \\ &+ \int dt_3 dt_4 dt_1 \int d\omega d\omega' d\omega'' \frac{e^{i\omega t_1}}{(2\pi)^3} e^{-i\omega'(t_1-t_4)} e^{-i\omega''(t_4-t_3)} e^{-i\omega'''t_3} G_r^{(0)}(\omega') \Sigma_r(\omega'') G_r(\omega''') \\ &= G_r^{(0)}(\omega) + \int d\omega d\omega' d\omega'' \delta(\omega - \omega') \delta(\omega' - \omega'') \delta(\omega'' - \omega''') G_r^{(0)}(\omega') \Sigma_r(\omega'') G_r(\omega''') \\ &= G_r^{(0)}(\omega) + G_r^{(0)}(\omega) \Sigma_r(\omega) G_r(\omega). \quad (3.70) \end{aligned}$$

Es löst sich also alles in Gefälligkeit auf. An jeder ‘Schnittstelle’ gilt Energie- (Frequenz)Erhaltung, was eine Folge der elastischen Wechselwirkung zwischen dem Dot und seiner Umgebung ist.

Generell spielt diese Art von Energieerhaltung eine große Rolle in der Störungstheorie, auch im Nichtgleichgewicht, da sich selbst dort viele Probleme letztlich wieder auf Gleichgewichtsfunktionen beziehen.

Die Gleichung für $G_r(\omega)$ kann jetzt algebraisch einfach aufgelöst werden;

$$G_r(\omega) = ([G_r^{(0)}(\omega)]^{-1} - \Sigma_r(\omega))^{-1}. \quad (3.71)$$

Explizit ist aus Gl. (3.49)

$$\Sigma = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & g_{k\alpha}^{-+} \\ g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

$$= \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & -g_{k\alpha}^{-+} \\ -g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix} \quad (3.73)$$

und wegen $\Sigma_r = \Sigma_{-+} + \Sigma_{--}$, Gl. (3.67), haben wir mit Gl. (3.62)

$$\Sigma_r(\omega) = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 (g_{k\alpha}^{--} - g_{k\alpha}^{-+}) = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 g_{k\alpha}^r = \sum_{k\alpha} \frac{|V_{k\alpha}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\alpha} + i0^+}. \quad (3.74)$$

Die retardierte Selbstenergie hat wegen der Dirac-Identität einen Real- und einen Imaginärteil,

$$\Sigma_r(\omega) = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 \left(P \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k\alpha}} - i\pi \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}) \right). \quad (3.75)$$

Da es sich um eine retardierte Funktion handelt, haben wir wieder eine kausale Struktur und entsprechende Kramers-Kronig Integralrelationen, die Real- und Imaginärteil miteinander verknüpfen. Für den letzteren definieren wir

$$\Gamma_\alpha(\omega) \equiv 2\pi \sum_k |V_{k\alpha}|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}), \quad \text{Tunnelrate.} \quad (3.76)$$

Diese Tunnelraten erhält man auch in einfacher zeitabhängiger Störungstheorie über Fermis Goldene Regel. Es ist also

$$\Im \Sigma_r(\omega) = -\frac{1}{2} \sum_\alpha \Gamma_\alpha(\omega). \quad (3.77)$$

Statt Gl. (3.76) mikroskopisch für irgendwelche Matrixelemente $V_{k\alpha}$ auszuwerten, setzt man meist $\Gamma_\alpha(\omega)$ phänomenologisch an. Ein besonders einfaches Modell ist

$$\Gamma_\alpha(\omega) = \text{const}, \quad \text{konstante Tunnelraten,} \quad (3.78)$$

d.h. man berücksichtigt die Energieabhängigkeit gar nicht. In diesem Fall fällt der Realteil der Selbstenergie Σ_r weg und die retardierte GF des Dots wird besonders einfach,

$$G_r(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i\frac{\Gamma}{2}}, \quad \Gamma \equiv \sum_\alpha \Gamma_\alpha. \quad (3.79)$$

Die Interpretation dieses recht einfachen Ergebnisses ist trotzdem interessant. Zunächst sehen wir, dass sich im Vergleich zur ‘freien’ retardierten GF des Dots

$$G_r^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i0+}, \quad \Gamma \equiv \sum_\alpha \Gamma_\alpha. \quad (3.80)$$

der Pol knapp unterhalb der reellen ω -Achse weiter in die untere Hälfte der komplexen ω -Ebene verschiebt. Als retardierte GF ist $G_r(\omega)$ in der oberen Halbebene weiterhin analytisch. Der Pol bei

$$\omega_p = \varepsilon_0 - i\frac{\Gamma}{2} \quad (3.81)$$

beschreibt den zeitlichen, exponentiellen Zerfall der durch die GF ausgedrückten Korrelation von Feldoperatoren. Durch Fourier-Rücktrafo finden wir nämlich

$$G_r(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i\frac{\Gamma}{2}} = -i\theta(t) e^{-i\varepsilon_0 t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t}. \quad (3.82)$$

AUFGABE: Überprüfe dieses Ergebnis durch Integration in der komplexen Ebene.

3.3 Zählstatistik

Uns interessiert beim Transport die Statistik der innerhalb einer Zeitspanne t zwischen verschiedenen räumlichen Gebieten übertragenen Ladungen. Das führt auf das Problem der Ladungstransfer-Statistik, oder allgemeiner der *Zählstatistik*. Für eine Einführung vgl. NAZAROV/BLANTER. Wir benutzen im Folgenden eine Definition, die auf zwei hintereinanderfolgende von-Neumann-Projektionen beruht ¹, und arbeiten mit verallgemeinerten Greenschen Funktionen ².

Das Zählen einzelner Fermionen ist z.B. auch dort von besonderem Interesse, wo *Ströme* nicht direkt gemessen werden können wie z.B. bei ungeladenen Fermionen.

3.3.1 von-Neumann- Messung

Sei \hat{N} ein Teilchenzahloperator mit Eigenwerten $n = 0, 1, 2, \dots$, und $\rho(t)$ der Zustand eines Quantensystems zur Zeit t . Nach dem Projektionspostulat wird mit Wahrscheinlichkeit $p(n, t) \equiv \text{Tr}\rho(t)\hat{P}_n$ der Eigenwert n gemessen, wenn \hat{P}_n der Projektionsoperator auf einen Unterraum zum Eigenwert n ist. Wir können $p(n, t)$ umschreiben als

$$\begin{aligned} p(n, t) &\equiv \text{Tr}\rho(t) \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{n,m} \hat{P}_m & (3.83) \\ &= \text{Tr}\rho(t) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} \sum_{m=0}^{\infty} e^{i\lambda m} \hat{P}_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} \text{Tr}\rho(t) e^{i\lambda \hat{N}}. \end{aligned}$$

Hierbei haben wir die Spektraldarstellung

$$e^{i\lambda \hat{N}} = \sum_{m=0}^{\infty} e^{i\lambda m} \hat{P}_m \quad (3.84)$$

benutzt.

Bis hierher haben wir noch nichts über die Anfangsbedingung der Zustands $\rho(t)$ ausgesagt. Im Folgenden nehmen wir an, dass zur Zeit $t = 0$ eine Messung von \hat{N} mit dem Ergebnis n_0 erfolgt, die das System in einem Eigenzustand von \hat{N} präpariert;

$$\hat{N}\rho(0) = n_0\rho(0). \quad (3.85)$$

Wir definieren damit die Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(n, t) &\equiv p(n + n_0, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda(n+n_0)} \text{Tr}\rho(t) e^{i\lambda \hat{N}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} \text{Tr}\rho(0) U^\dagger(t) e^{i\lambda \hat{N}} U(t) e^{-i\lambda n_0}, \quad n \geq n_0, \end{aligned} \quad (3.86)$$

¹ K. Schönhammer, Phys. Rev. B **75**, 205329 (2007).

² A. O. Gogolin, A. Komnik, Phys. Rev. B **73**, 195301 (2006).

wobei wir die Zeitentwicklung

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \quad (3.87)$$

für den Zustand $\rho(t)$ eingesetzt und Gl. (3.83) benutzt haben. Im letzten Schritt benutzen wir jetzt Gl. (3.85) für $e^{-i\lambda\hat{N}}\rho(0) = e^{-i\lambda n_0}\rho(0)$ für

$$\begin{aligned} P(n, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} g_t(\lambda) \\ g_t(\lambda) &\equiv \text{Tr} \rho(0) U^\dagger(t) e^{i\lambda\hat{N}} U(t) e^{-i\lambda\hat{N}}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Das ist die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t den Wert $n + n_0$ zu messen, wenn zur Zeit $t = 0$ der Wert n_0 gemessen wurde. Hier und im Folgenden soll eine unitäre Zeitentwicklung

$$U(t) = e^{-i\mathcal{H}t} \quad (3.89)$$

mit zeitunabhängigem Hamiltonian angenommen werden.

Definition Die Funktion

$$g_\lambda(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P(n, t) \quad (3.90)$$

heißt *momentenerzeugende* Funktion, die Fourier-Variable λ heißt *Zählfeld* zur Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(n, t)$.

Wir schreiben die momentenerzeugende Funktion zunächst in einer etwas symmetrischeren Form, indem wir $[\hat{N}, \rho(0)] = 0$ benutzen;

$$g_\lambda(t) = \text{Tr} \rho(0) e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} U^\dagger(t) e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} U(t) e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} \quad (3.91)$$

oder

$$g_\lambda(t) = \langle U_{-\lambda}^\dagger(t) U_\lambda(t) \rangle_0, \quad U_\lambda(t) \equiv e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} U(t) e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}}. \quad (3.92)$$

Definition Der Erwartungswert $\langle U_2^\dagger(t) U_1(t) \rangle_0$ des Produktes eines vorwärts ($U_1(t)$) und rückwärts ($U_2^\dagger(t)$) laufenden unitären Operators heißt *Influenzfunktional*.

Die momentenerzeugende Funktion $g_t(\lambda)$ ist also ein Influenzfunktional mit Zählfeldern $\lambda/2$, die auf dem Vorwärts- bzw. Rückwärtsweg das genau entgegengesetzte Vorzeichen haben. Solche Funktionale spielen auch im Bereich der Quantendissipation (Feynman-Vernon-Influenzfunktional) eine große Rolle, vgl. SKRIPT STATISTIK I (2007).

Wenn wir die Definition der Exponentialfunktion ausnutzen, gilt weiterhin

$$U_\lambda(t) \equiv e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} U(t) e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} = e^{-it\hat{\mathcal{H}}_\lambda}, \quad \hat{\mathcal{H}}_\lambda \equiv e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} \hat{\mathcal{H}} e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}}, \quad (3.93)$$

so dass wir

$$g_\lambda(t) = \langle e^{it\hat{\mathcal{H}}_{-\lambda}} e^{-it\hat{\mathcal{H}}_\lambda} \rangle_0 \quad (3.94)$$

schreiben können (beachte, dass $\hat{\mathcal{H}}_\lambda^\dagger = \hat{\mathcal{H}}_\lambda$ hermitesch ist.)

3.3.2 Tunnel-Modell

Wir betrachten wieder einen Tunnel-Hamiltonian der Form

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} + \hat{\mathcal{H}}_d + \hat{\mathcal{V}} \quad (3.95)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} \equiv \sum_{k\alpha=L/R} \varepsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}, \quad \hat{\mathcal{V}} \equiv \sum_{kn\alpha=L/R} V_{kn\alpha} c_{k\alpha}^\dagger d_n + H.c., \quad (3.96)$$

mit ‘Dot’-Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}_d$. Gezählt werden soll im Folgenden immer im *rechten* Reservoir, d.h.

$$\hat{N} = \hat{N}_R = \sum_k c_{kR}^\dagger c_{kR} \quad (3.97)$$

Das modifizierte $U_\lambda(t)$ aus Gl. (3.92) bzw. das zugehörige $\hat{\mathcal{H}}_\lambda^\dagger$ können nun explizit ausgerechnet werden. In der Tat ist $\hat{\mathcal{H}}_\lambda^\dagger$ nichts anderes als ein kanonisch transformierter Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}$, bei dem nur die Operatoren c_{kR} und c_{kR}^\dagger transformiert werden, da alle anderen Operatoren mit N_R vertauschen. Wir haben

$$e^{i\frac{\Delta}{2}\hat{N}} c_{kR} e^{-i\frac{\Delta}{2}\hat{N}} = e^{-i\frac{\Delta}{2}} c_{kR}, \quad e^{i\frac{\Delta}{2}\hat{N}} c_{kR}^\dagger e^{-i\frac{\Delta}{2}\hat{N}} = e^{i\frac{\Delta}{2}} c_{kR}^\dagger, \quad (3.98)$$

was durch NACHRECHNEN mit verschachtelten Kommutatoren oder einfach aus einer ‘Zeitentwicklung’ mit $\frac{\Delta}{2}\hat{N}$ folgt. Wir haben also

$$\hat{\mathcal{H}}_\lambda \equiv \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} + \hat{\mathcal{H}}_d + \hat{\mathcal{V}}_\lambda \quad (3.99)$$

$$\hat{\mathcal{V}}_\lambda = \sum_{kn} V_{knR} e^{i\frac{\Delta}{2}} c_{kR}^\dagger d_n + V_{knL} c_{kL}^\dagger d_n + H.c. \quad (3.100)$$

3.3.3 Verallgemeinerte Greensche Funktionen

Das Influenzfunktional Gl. (3.92) zeigt bereits, dass wir auf der Kontur mit *zwei* verschiedenen Hamiltonians arbeiten, nämlich mit $\hat{\mathcal{H}}_\lambda$ auf dem Vorwärtszweig ($--$ Zweig) und mit $\hat{\mathcal{H}}_{-\lambda}$ auf dem Rückwärtszweig ($+-$ Zweig).

Etwas verallgemeinernd betrachten wir zwei Hamiltonians

$$H_1 \equiv H_0 + V_1, \quad H_2 \equiv H_0 + V_2 \quad (3.101)$$

und entsprechende Propagatoren

$$U_j(t) \equiv e^{-iH_j t}, \quad j = 1, 2, \quad (3.102)$$

wobei $j = 1$ dem Vorwärts- und $j = 2$ dem Rückwärtszweig.

Wir definieren ein *verallgemeinertes Heisenbergbild* für Operatoren \hat{A} über

$$\hat{A}(t) \equiv U_2^\dagger(t) \hat{A} U_1(t), \quad (3.103)$$

und das übliche Wechselwirkungsbild für Schrödingeroperatoren \hat{A} ;

$$\tilde{A}(t) \equiv U_0^\dagger(t) \hat{A} U_0(t), \quad U_0(t) \equiv e^{-iH_0 t}, \quad (3.104)$$

d. h. wir benutzen die für die einfache Zeitentwicklung mit H_0 . Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} U_1(t) &= U_0(t) \tilde{U}_1(t), & \tilde{U}_1(t) &\equiv T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{V}_1(t')} \\ U_2(t) &= U_0(t) \tilde{U}_2(t), & \tilde{U}_2(t) &\equiv T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{V}_2(t')} \end{aligned} \quad (3.105)$$

und können so umschreiben

$$\hat{A}(t) \equiv U_2^\dagger(t) \hat{A} U_1(t) = \tilde{U}_2^\dagger(t) \tilde{A}(t) \tilde{U}_1(t). \quad (3.106)$$

In Analogie zu den üblichen Greenschen Funktionen führen wir jetzt zunächst wieder einen *Kontur-Ordnungsoperator* T_C ein und schreiben

$$\hat{A}(t) = T_C e^{-i \int_c dt' \tilde{V}_C(t')} \tilde{A}(t) \quad (3.107)$$

Hierbei läuft die Kontur von 0 bis zu t auf dem oberen Vorwärts- (–)–Zweig C_1 , wo $\tilde{V}_C(t') = \tilde{V}_1(t')$, und von t zurück nach 0 auf dem unteren Rückwärts- (+)–Zweig C_2 , auf dem $\tilde{V}_C(t') = \tilde{V}_2(t')$. Das kombinatorische Argument zur Herleitung dieser Identität ist dabei genau das gleiche wie im Fall $V_1 = V_2$, wo wir ja nur die Aufspaltung in 2^n Vorwärts- und Rückwärtsmöglichkeiten benutzt haben.

Das uns interessierende Influenzfunktional, d.h. die momentenerzeugende Funktion *Gl.* (3.92), hat in dieser Formulierung die Form

$$g_\lambda(t) \equiv \langle U_{-\lambda}^\dagger(t) U_\lambda(t) \rangle = \langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \rangle \quad (3.108)$$

mit der ‘Störung’ $\tilde{V}_C(s) = \tilde{V}_\lambda(s)$ auf dem Vorwärtszweig, $\tilde{V}_C(s) = \tilde{V}_{-\lambda}(s)$ auf dem Rückwärtszweig. Als verallgemeinerte Greensche Funktion definieren wir jetzt ³

$$G_\lambda(1, 1') \equiv -i \frac{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \tilde{\Psi}(1) \tilde{\Psi}^\dagger(1') \rangle_\lambda}{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \rangle_\lambda}. \quad (3.109)$$

Diese Definition fällt für $\lambda = 0$ mit dem Ausdruck *Gl.* (3.19) zur üblichen konturgeordneten GF zusammen (siehe z.B. HAUG/JAUHO) ⁴. Der Unterschied zu den üblichen GF ist jetzt das Auftreten des Nenners $g_\lambda(t)$ in der Definition, der ja für $\lambda = 0$ einfach Eins wird. Da das eigentlich ja die uns interessierende Größe ist, könnte man fragen, warum wir $g_\lambda(t)$ nicht direkt ausrechnen. Es zeigt sich aber, dass die Berechnung von Greenschen Funktionen wesentlich bequemer als die direkte Berechnung ist, da für GF viele der bereits bekannten Berechnungen in leicht abgewandelter Form übernommen werden können.

³ A. O. Gogolin, A. Komnik, Phys. Rev. B **73**, 195301 (2006).

⁴ Für die üblichen Keldysh-GF ($\lambda = 0$) ergeben sich aus dieser Definition dann die sog. *Langreth-Regeln* zur Berechnung konturgeordneter Produkte. Das ist eine Alternative zur Berechnung von GF mittels Ausmultiplikation der Keldysh 2×2 -Matrizen.

3.3.4 Kumulantenerzeugende Funktion

Definition Der Logarithmus der momentenerzeugenden Funktion heißt kumulantenerzeugende Funktion

$$\mathcal{G}_\lambda(t) \equiv \ln g_\lambda(t). \quad (3.110)$$

Der Zusammenhang mit den verallgemeinerten Greenschen Funktionen entsteht nun durch Differentiation von $\mathcal{G}_\lambda(t)$ nach dem Zählfeld λ ,

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{G}_\lambda(t) = \frac{\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t)}{g_\lambda(t)}. \quad (3.111)$$

Der Zähler ergibt sich hierbei zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle U^\dagger(t) e^{i\lambda \hat{N}} U(t) e^{-i\lambda \hat{N}} \rangle \\ &= i \langle U^\dagger(t) e^{i\lambda \hat{N}} (\hat{N} U(t) - U(t) \hat{N}) e^{-i\lambda \hat{N}} \rangle = i \langle U^\dagger(t) e^{i\lambda \hat{N}} (\hat{N} - n_0) U(t) e^{-i\lambda \hat{N}} \rangle, \end{aligned} \quad (3.112)$$

wobei wir hier wieder ausgenutzt haben, dass $\hat{N} \rho_0 = n_0 \rho_0$ mit dem Anfangswert n_0 .

Jetzt kommt die entscheidende Näherung, die den Zusammenhang mit dem Stromoperator und den GF bringt:

$$\hat{N} - n_0 \rightarrow t \hat{I}, \quad t \rightarrow \infty \text{ in Gl. (3.112)}. \quad (3.113)$$

Hierbei ist

$$\hat{I} \equiv i[\mathcal{H}, \hat{N}]. \quad (3.114)$$

der zum Teilchenzahloperator \hat{N} zugehörige Stromoperator, d.h. einfach dessen zeitliche Ableitung über die Heisenberg-Bewegungsgleichungen.

In dem obigen Modell ist also mit $\hat{N} = \hat{N}_R$

$$\hat{I} = -i \sum_{kn} \left(V_{knR} c_{kR}^\dagger d_n - V_{knR}^* d_n^\dagger c_{kR} \right). \quad (3.115)$$

Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) &\approx \\ &t \left\langle e^{-i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} U^\dagger(t) e^{i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} e^{i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} \left(\sum_{kn} \left(V_{knR} c_{kR}^\dagger d_n - V_{knR}^* d_n^\dagger c_{kR} \right) \right) e^{-i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} e^{i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} U(t) e^{-i\frac{\lambda}{2} \hat{N}} \right\rangle \\ &= t \left\langle U_{-\lambda}^\dagger(t) \left(\sum_{kn} \left(V_{knR} e^{i\frac{\lambda}{2}} c_{kR}^\dagger d_n - V_{knR}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} d_n^\dagger c_{kR} \right) \right) U_\lambda(t) \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.116)$$

wobei wir wieder Gl. (3.98) benutzt haben.

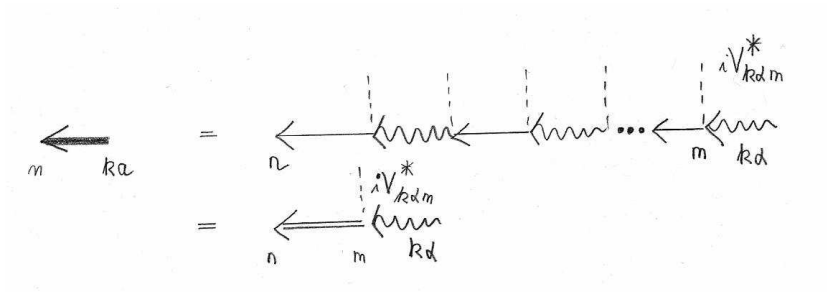


Fig. 3.4: Diagramm für gemischte GF $G_{n,k\alpha}(\omega)$, Gl. (3.121).

Jetzt sind wir fast am Ziel: der obige Ausdruck enthält

$$\left\langle U_{-\lambda}^\dagger(t) c_{kR}^\dagger d_n U_\lambda(t) \right\rangle = \left\langle T_C e^{-i \int_c dt' \tilde{V}_C(t')} \tilde{c}_{kR}^\dagger(t) \tilde{d}_n(t) \right\rangle, \quad (3.117)$$

wobei wir für die zweite Umformung Gl. (3.107) benutzt haben. Wir vergleichen das mit der Definition

$$G_{k\alpha,n}(t, t') \equiv -i \frac{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \tilde{c}_{k\alpha}(t) \tilde{d}_n^\dagger(t') \rangle}{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \rangle}, \quad G_{n,k\alpha}(t, t') \equiv -i \frac{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \tilde{d}_n(t) \tilde{c}_{k\alpha}^\dagger(t') \rangle}{\langle T_C e^{-i \int_c ds \tilde{V}_C(s)} \rangle} \quad (3.118)$$

Die Wahl $t' = t + 0^+$ liefert dann jeweils die kausale GF, z.B.

$$G_{k\alpha,n}^{--}(t, t + 0^+) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{k\alpha,n}^{--}(\omega) e^{-i\omega 0^+}, \quad (3.119)$$

so dass insgesamt

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \approx -it \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega 0^+} \sum_{kn} \left(V_{knR} e^{i\frac{\lambda}{2}} G_{n,kR}^{--}(\omega) - V_{knR}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} G_{kR,n}^{--}(\omega) \right). \quad (3.120)$$

3.3.5 Gemischte GF

Im nächsten Schritt werden jetzt die gemischten GF $G_{k\alpha,n}(t, t')$ und $G_{n,k\alpha}(t, t')$ berechnet.

Die GF $G_{n,k\alpha}(\omega)$ ist gegeben durch

$$iG_{n,k\alpha}(\omega) = \sum_m \left(iG_{nm}(\omega) (i\hat{V}_{mk\alpha}^*) i g_{k\alpha}(\omega) \right) \quad (3.121)$$

$$G_{nm} \equiv \begin{pmatrix} G_{nm}^{--} & G_{nm}^{-+} \\ G_{nm}^{+-} & G_{nm}^{++} \end{pmatrix}, \quad g_{k\alpha} \equiv \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & g_{k\alpha}^{-+} \\ g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix}, \quad \hat{V}_{mk\alpha}^* \equiv \begin{pmatrix} -V_{kam}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} & 0 \\ 0 & V_{kam}^* e^{i\frac{\lambda}{2}} \end{pmatrix},$$

was man wieder am besten diagrammatisch sieht (SKIZZE). Durch Matrixmultiplikation

z.B.

$$\begin{aligned} G_{n,k\alpha}^{-+} &= \sum_m \left(G_{nm}^{--} V_{k\alpha m}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} g_{k\alpha}^{-+} - G_{nm}^{-+} V_{k\alpha m}^* e^{i\frac{\lambda}{2}} g_{k\alpha}^{++} \right) \\ G_{n,k\alpha}^{--} &= \sum_m \left(G_{nm}^{--} V_{k\alpha m}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} g_{k\alpha}^{--} - G_{nm}^{-+} V_{k\alpha m}^* e^{i\frac{\lambda}{2}} g_{k\alpha}^{+-} \right). \end{aligned} \quad (3.122)$$

Weiterhin ist $G_{k\alpha,n}(\omega)$ gegeben durch

$$\begin{aligned} iG_{k\alpha,n}(\omega) &= \sum_m \left(ig_{k\alpha}(\omega) (i\hat{V}_{k\alpha m}) iG_{mn}(\omega) \right) \\ \hat{V}_{k\alpha m} &\equiv \begin{pmatrix} -V_{k\alpha m} e^{i\frac{\lambda}{2}} & 0 \\ 0 & V_{k\alpha m} e^{-i\frac{\lambda}{2}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.123)$$

und durch Matrixmultiplikation erhalten wir

$$G_{k\alpha,n}^{--} = \sum_m \left(g_{k\alpha}^{--} V_{k\alpha m} e^{i\frac{\lambda}{2}} G_{mn}^{--} - g_{k\alpha}^{-+} V_{k\alpha m} e^{-i\frac{\lambda}{2}} G_{mn}^{+-} \right). \quad (3.124)$$

3.3.6 Beispiel: ein resonantes Niveau

Im Folgenden betrachten wir der Einfachheit halber nur ein ($m = 1$) Niveau im ‘Dot’-Hamiltonian \mathcal{H}_r . Dann fällt die Summe über m weg und wir haben

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) &\approx -it \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega 0^+} \sum_k \left(V_{knR} e^{i\frac{\lambda}{2}} G_{n,kR}^{--}(\omega) - V_{knR}^* e^{-i\frac{\lambda}{2}} G_{kR,n}^{--}(\omega) \right) \\ &= it \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega 0^+} \sum_k |V_{knR}|^2 \left(e^{i\lambda} G^{+-}(\omega) g_{kR}^{+-}(\omega) - e^{-i\lambda} g_{kR}^{-+}(\omega) G^{+-}(\omega) \right) \end{aligned} \quad (3.125)$$

wobei $G \equiv G_{11}$ die GF des Quantendots bezeichnet. Diese Dot-GF G müssen jetzt über eine Dyson-Gleichung mit Hilfe einer Selbstenergie Σ berechnet werden. Dazu schreiben wir

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G \quad (3.126)$$

jeweils mit den 2×2 -Matrizen der vier GF-Komponenten. Wie vorher sind dieses verallgemeinerte GF mit eingebautem Zählfeld λ und dem Nenner $g_t(\lambda)$. Die Selbstenergie ist definiert durch (DIAGRAMM-SKIZZE)

$$\begin{aligned} iG &= iG^{(0)} + iG^{(0)} \sum_{k\alpha} (i\hat{V}_{k\alpha}^*) i g_{k\alpha} (i\hat{V}_{k\alpha}) iG \\ -i\Sigma &\equiv \sum_{k\alpha} (i\hat{V}_{k\alpha}) i g_{k\alpha} (i\hat{V}_{k\alpha}^*). \end{aligned} \quad (3.127)$$

In Matrixform also

$$\begin{aligned}
\Sigma &= \sum_{k\alpha} \begin{pmatrix} -V_{k\alpha}^* e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & V_{k\alpha}^* e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & g_{k\alpha}^{-+} \\ g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -V_{k\alpha} e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & V_{k\alpha} e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}} g_{k\alpha}^{--} & e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}} g_{k\alpha}^{-+} \\ -e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}} g_{k\alpha}^{+-} & e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}} g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 \begin{pmatrix} g_{k\alpha}^{--} & -e^{-i\lambda\alpha} g_{k\alpha}^{-+} \\ -e^{i\lambda\alpha} g_{k\alpha}^{+-} & g_{k\alpha}^{++} \end{pmatrix}, \quad \lambda\alpha \equiv \lambda\delta_{\alpha R}. \tag{3.128}
\end{aligned}$$

Jetzt setzen wir die GF in den Reservoirs ein;

$$g_{k\alpha}^{-+}(\omega) = 2\pi i f_\alpha(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_k), \quad g_{k\alpha}^{+-}(\omega) = -2\pi i (1 - f_\alpha(\omega)) \delta(\omega - \varepsilon_k) \tag{3.129}$$

$$g_{k\alpha}^{--}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+} + 2\pi i f_\alpha(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_k) \tag{3.130}$$

$$g_{k\alpha}^{++}(\omega) = -\frac{1}{\omega - \varepsilon_k - i0^+} + 2\pi i f_\alpha(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_k) \tag{3.131}$$

Im *Flachbandlimes* verschwinden die Hauptwertintegralanteile von

$$\begin{aligned}
\Sigma^{--} &= \Sigma^{++} = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 (2\pi i f_\alpha(\omega) - \pi i) \delta(\omega - \varepsilon_k) = i \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha} \left(f_{\alpha}(\omega) - \frac{1}{2} \right) \\
\Gamma_{\alpha} &\equiv 2\pi \sum_k |V_{k\alpha}|^2 \delta(\omega - \varepsilon_k), \quad \text{Tunnelrate zum Reservoir } \alpha. \tag{3.132}
\end{aligned}$$

Weiterhin ist dann

$$\Sigma^{-+} = -\sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 2\pi i f_\alpha(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_k) e^{-i\lambda\alpha} = -i \left(\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega) e^{-i\lambda} \right) \tag{3.133}$$

$$\Sigma^{+-} = \sum_{k\alpha} |V_{k\alpha}|^2 2\pi i (1 - f_\alpha(\omega)) \delta(\omega - \varepsilon_k) e^{i\lambda\alpha} = i \left(\Gamma_L (1 - f_L(\omega)) + \Gamma_R (1 - f_R(\omega)) e^{i\lambda} \right).$$

Die isolierten Dot-GF ist

$$G^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i0^+} & 0 \\ 0 & \frac{-1}{\omega - \varepsilon_0 - i0^+} \end{pmatrix}, \tag{3.134}$$

(hier ist G^{+-} weggelassen worden, NACHPRÜFEN dass das nichts ausmacht).
Inversion von

$$(1 - G^{(0)}\Sigma)G = G^{(0)} \rightsquigarrow G = (1 - G^{(0)}\Sigma)^{-1}G^{(0)} = ([G^{(0)}]^{-1} - \Sigma)^{-1} \tag{3.135}$$

liefert (Komnik/Gogolin: Definition der Raten $\Gamma_{L/R}$ unterscheidet sich von unserer um einen Faktor 2.)

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_0 - i \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha} \left(f_{\alpha}(\omega) - \frac{1}{2} \right) & i \left(\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega) e^{-i\lambda} \right) \\ -i \left(\Gamma_L (1 - f_L(\omega)) + \Gamma_R (1 - f_R(\omega)) e^{i\lambda} \right) & -\omega + \varepsilon_0 - i \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha} \left(f_{\alpha}(\omega) - \frac{1}{2} \right) \end{pmatrix} \tag{3.136}$$

Jetzt müssen wir wieder unsere Ausgangsformel Gl. (3.125) herausholen, d.h.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \Big|_{\lambda=0} &\approx = it \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_k |V_{knR}|^2 \left(e^{i\lambda} G^{-+}(\omega) g_{kR}^{+-}(\omega) - e^{-i\lambda} g_{kR}^{-+}(\omega) G^{+-}(\omega) \right) \\
&= t \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(e^{i\lambda} G^{-+}(\omega) (1 - f_R(\omega)) \Gamma_R - e^{-i\lambda} f_R(\omega) \Gamma_R G^{+-}(\omega) \right) \\
&= -it \frac{\Gamma_R}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{D_0(\omega)} \left(e^{i\lambda} (1 - f_R(\omega)) \left(\Gamma_L f_L(\omega) + \Gamma_R f_R(\omega) e^{-i\lambda} \right) \right) \\
&+ it \frac{\Gamma_R}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{D_0(\omega)} \left(e^{-i\lambda} f_R(\omega) \left(\Gamma_L (1 - f_L(\omega)) + \Gamma_R (1 - f_R(\omega)) e^{i\lambda} \right) \right) \\
&= -it \frac{\Gamma_R \Gamma_L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{D_0(\omega)} \left(e^{i\lambda} (1 - f_R(\omega)) f_L(\omega) - e^{-i\lambda} (1 - f_L(\omega)) f_R(\omega) \right).
\end{aligned} \tag{3.137}$$

Hierbei haben wir die Matrix für G^{-1} invertiert, und $D_0(\omega)$ bezeichnet die für diese Inversion benötigte Determinante. Für $\lambda = 0$ ist diese z.B. (NACHRECHNEN!)

$$-D_0(\omega) = (\omega - \varepsilon_0)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_R + \Gamma_L)^2, \tag{3.138}$$

woraus das Ergebnis

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \Big|_{\lambda=0} \approx it \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \frac{\Gamma_R \Gamma_L}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_R + \Gamma_L)^2} \tag{3.139}$$

folgt. Wegen

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \Big|_{\lambda=0} = i \langle (\hat{N}(t) - n_0) \rangle_0 \approx it \langle \hat{I} \rangle_0 \tag{3.140}$$

erhalten wir damit z.B. den stationären Strom durch das resonante Niveau (vgl. HAUG/JAUHO),

$$\langle \hat{I} \rangle_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] T(\omega) \tag{3.141}$$

$$T(\omega) \equiv \frac{\Gamma_R \Gamma_L}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_R + \Gamma_L)^2}, \quad \text{Transmissionskoeffizient} . \tag{3.142}$$

Wir erhalten also das Resultat, das wir auch nach der Landauer-Büttiker-Formel Gl. (1.71) erwartet hätten! Überprüft werden muss hier natürlich noch, dass $T(\omega)$ tatsächlich mit dem aus der Streutheorie berechneten Transmissionskoeffiziente durch den Quantenpunkt zusammenfällt (AUFGABE).

3.4 Levitov-Lesovik-Formel

3.4.1 Herleitung aus den verallgemeinerten Greensfunktionen

Für $\lambda \neq 0$ ergibt sich aus unserer obigen Rechnung für den Tunnel-Hamiltonian (NACHPRÜFEN)

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \approx it \frac{1}{2\pi} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega T(\omega) \frac{e^{i\lambda}(1 - f_R(\omega))f_L(\omega) - e^{-i\lambda}(1 - f_L(\omega))f_R(\omega)}{1 + T(\omega) [(e^{i\lambda} - 1)(1 - f_R(\omega))f_L(\omega) - (e^{-i\lambda} - 1)(1 - f_L(\omega))f_R(\omega)]}. \quad (3.143)$$

Den Integranden können wir als Ableitung nach λ umschreiben und erhalten so

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{G}_\lambda(t) \equiv \frac{\partial}{\partial \lambda} g_\lambda(t) \approx t \frac{1}{2\pi} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \left(1 + T(\omega) \left[(e^{i\lambda} - 1)(1 - f_R(\omega))f_L(\omega) + (e^{-i\lambda} - 1)(1 - f_L(\omega))f_R(\omega) \right] \right). \quad (3.144)$$

und damit (bis auf eine für $t \rightarrow \infty$ unwesentliche Integrationskonstante) für die kumulantenerzeugende Funktion $\mathcal{G}_\lambda(t)$, Gl. (3.110),

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \mathcal{G}_\lambda(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \ln \left(1 + T(\omega) \left[(e^{i\lambda} - 1)(1 - f_R(\omega))f_L(\omega) + (e^{-i\lambda} - 1)(1 - f_L(\omega))f_R(\omega) \right] \right) \quad (3.145)$$

, Levitov-Lesovik-Formel.

Explizit hergeleitet haben wir die Levitov-Lesovik-Formel hier nur für den Spezialfall des Modells eines resonanten Niveaus (Tunnel-Hamiltonian). Die Formel gilt jedoch allgemein für nicht-wechselwirkende fermionische Systeme, d.h. Streuprobleme (Einteilchenprobleme) mit quadratischen Hamiltonians, wo sie auch allgemein über eine Determinantenformel hergeleitet werden kann ⁵

Der große Vorteil unserer hier durchgeführten Herleitung über die verallgemeinerten GF besteht darin, dass auch Wechselwirkungen zumindest störungstheoretisch mit in die Zählstatistik eingebaut werden können und damit eine *Verallgemeinerung der Levitov-Lesovik-Formel* auf wechselwirkende Systeme erreicht wird. Interessant ist das z.B. für den molekularen Transport bei Ankopplung an Schwingungsfreiheitsgrade (Phononen). ⁶

⁵ I. Klich, in ‘*Quantum Noise in Mesoscopic Physics*’, ed. Y. V. Nazarov, NATO Science Series, Kluwer (2003).

⁶ Eine aktuelle Arbeit hierzu ist F. Haupt, T. Novotný, W. Belzig, Phys. Rev. B **82**, 165441 (2010).

3.4.2 Diskussion

(NAZAROV/BLANTER) Eine einfache Interpretation ergibt sich für die Annahme eines konstanten $T(\omega) = T$ in der LL-Formel. Wir betrachten zunächst (Integraltafel)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_L(\omega)(1 - f_R(\omega)) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega - \Delta\mu)(1 - f(\omega)) = \frac{-\Delta\mu}{e^{-\beta\Delta\mu} - 1}, \quad (3.146)$$

wobei wir die Differenz der chemischen Potentiale eingeführt haben;

$$\Delta\mu \equiv \mu_L - \mu_R. \quad (3.147)$$

Für tiefe Temperaturen $\beta\Delta \gg 1$ ist der Integrand tatsächlich nur eine Einheitskasten-funktion im *Transportfenster* $[\mu_R, \mu_L]$. Entsprechend bekommen wir dann für $\Delta\mu > 0$ nur einen Beitrag vom Term $\propto f_L(\omega)(1 - f_R(\omega))$ in der Levitov-Formel;

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{G}_\lambda(t) \equiv \ln g_\lambda(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{t\Delta\mu}{2\pi} \ln [1 + T(e^{i\lambda} - 1)], \quad \beta\Delta \gg 1. \quad (3.148)$$

Motiviert durch die Landauer-Formel (ohne Spin) für den Strom $I = e^2/(2\pi\hbar)V = -e/(2\pi\hbar)\Delta\mu$ durch einen ballistischen Kanal, interpretieren wir ($\hbar = 1$ oben)

$$\frac{t\Delta\mu}{2\pi\hbar} = \frac{tI}{-e} \equiv N(t) \quad (3.149)$$

als gesamte Anzahl $N(t)$ der Elektronen, die an der Tunnelbarriere im Zeitintervall $[0, t]$ entweder reflektiert oder transmittiert werden: In der Tat können wir nach der binomischen Formel

$$g_\lambda(t \rightarrow \infty) = [1 + T(e^{i\lambda} - 1)]^{N(t)} = \sum_{n=0}^{N(t)} \binom{N(t)}{n} T^n (1 - T)^{N(t)-n} e^{in\lambda} \quad (3.150)$$

schreiben. Aus der Definition Gl. (3.90) der momentenerzeugenden Funktion, $g_t(\lambda) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P(n, t)$, folgt dann mit

$$P(n, t) = \theta(n) \binom{N(t)}{n} T^n (1 - T)^{N(t)-n}, \quad \text{Binomialverteilung.} \quad (3.151)$$

Der Tunnelprozess von links nach rechts stellt sich somit als ein ‘Glücksspiel’ dar, bei dem unter $N(t)$ Gesamtversuchen (Anrennen gegen die Barriere) nur n Versuche mit Wahrscheinlichkeit $P(n, t)$ erfolgreich (Durchtunneln) sind, wenn die ‘Gewinn’-Wahrscheinlichkeit jedes Mal T ist. Die Binomialverteilung beschreibt nämlich in der Statistik gerade diese Gewinn-Wahrscheinlichkeit.

4. DIE MASTERGLEICHUNG

Der folgende Zugang zur Quantenmechanik im Nichtgleichgewicht ist für stark wechselwirkende Systeme geeignet. Bei den Greenschen Funktionen im vorherigen Abschnitt sind wir durch das Wicksche Theorem letztlich immer auf wechselwirkungsfreie Hamiltonians als Bezugspunkt angewiesen. In den Mastergleichungen geht man dahingegen direkt von Vielteilchenzustände $|\alpha\rangle$ eines (Vielteilchen)–Hamiltonians aus. Der Nachteil besteht darin, dass man im Gegensatz zur den GF nicht so leicht unendliche, systematische Aufsummationen durchführen kann und meist auf einfache Störungstheorie in der Ankopplung des betrachteten Systems an ein *Reservoir* angewiesen ist. In vielen Fällen ist das aber ein realistischer Ausgangspunkt, da viele System-Reservoir-Kopplungen schwach sind und eine grosse Klasse physikalischer Probleme erfassen: Darunter sind Quantendissipation, quantenoptische Effekte wie der Laser, elektronischer Transport durch schwach gekoppelte, wechselwirkende Nanostrukturen wie Quantenpunkte mit Coulomb-Blockade, um nur einige zu nennen.

4.1 Ableitung der Mastergleichung

Wir betrachten die Zeitentwicklung einer Dichtematrix eines 'Universums' (Gesamtsystem, d.h. ein System und seine Umgebung) $\rho_{\text{total}}(t) = U(t)\rho_{\text{total}}(0)U^\dagger(t)$. Die Zeitentwicklung ist üblicherweise

$$U(t) = e^{-iHt}, \quad H = H_0 + V, \quad (4.1)$$

wobei V die Kopplung zwischen System und Umgebung ('System–Bad–Kopplung') beschreibt und

$$H_0 \equiv H_S + H_B \quad (4.2)$$

die Summe aus System– und Bad–Hamiltonian ist.

Etwas verallgemeinernd betrachten wir für die Vorwärts– und Rückwärtszeitentwicklung wieder zwei Hamiltonians und entsprechende Propagatoren

$$H_1 \equiv H_0 + V_1, \quad H_2 \equiv H_0 + V_2, \quad U_j(t) \equiv e^{-iH_j t}, \quad j = 1, 2 \quad (4.3)$$

und definieren

$$\chi(t) \equiv U_1(t)\rho_{\text{total}}(0)U_2^\dagger(t), \quad \text{verallgemeinerte Dichtematrix.} \quad (4.4)$$

Wir erinnern uns hier zur Motivation dieser Verallgemeinerung noch einmal an die Definition der Zählstatistik Gl. (3.88);

$$P(n, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} g_t(\lambda)$$

$$g_t(\lambda) \equiv \text{Tr} U_\lambda(t) \rho_{\text{total}}(0) U_{-\lambda}^\dagger(t), \quad U_\lambda(t) \equiv e^{i\frac{\lambda}{2}\hat{N}} U(t) e^{-i\frac{\lambda}{2}\hat{N}}. \quad (4.5)$$

Die momentenerzeugende Funktion $g_t(\lambda)$ kann hier also als Spur einer verallgemeinerten Dichtematrix des Gesamtsystems aufgefasst werden,

$$g_t(\lambda) = \text{Tr} \chi(t), \quad U_1(t) = U_\lambda(t), \quad U_2(t) = U_{-\lambda}(t). \quad (4.6)$$

Deshalb ist es nützlich, von vorneherein gleich etwas allgemeiner mit zwei unterschiedlichen Zeitentwicklungen zu arbeiten.

Wir definieren dementsprechend ein *verallgemeinertes Heisenbergbild* für Operatoren \hat{A} und $\chi(t)$ über

$$\begin{aligned} \hat{A}(t) &\equiv U_2^\dagger(t) \hat{A} U_1(t), & \tilde{A}(t) &\equiv U_0^\dagger(t) \hat{A} U_0(t), & U_0(t) &\equiv e^{-iH_0 t}, \\ \tilde{\chi}(t) &= e^{iH_0 t} \chi(t) e^{-iH_0 t}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} U_j(t) &= U_0(t) \tilde{U}_j(t), & \tilde{U}_j(t) &\equiv T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{V}_j(t')} \\ \frac{\partial}{\partial t} U_j(t) &= -i H_j U_j(t), & \frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}_j(t) &= -i \tilde{V}_j(t) \tilde{U}_j(t). \end{aligned} \quad (4.8)$$

und durch Ableiten nach t

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi}(t) &= i[H_0, \tilde{\chi}(t)] - i e^{iH_0 t} (H_1 \chi(t) - \chi(t) H_2) e^{-iH_0 t} \\ &= -i \left(\tilde{V}_1(t) \tilde{\chi}(t) - \tilde{\chi}(t) \tilde{V}_2(t) \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Für $V_1 = V_2$ entspricht das der uns aus der linearen Antworttheorie bekannten Gl. (2.5). In Integralform schreiben wir

$$\tilde{\chi}(t) = \chi(0) - i \int_0^t dt' \left(\tilde{V}_1(t') \tilde{\chi}(t') - \tilde{\chi}(t') \tilde{V}_2(t') \right). \quad (4.10)$$

Einsetzen in Gl. (4.9) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi}(t) &= -i \left(\tilde{V}_1(t) \chi(0) - \chi(0) \tilde{V}_2(t) \right) \\ &- \int_0^t dt' \left(\tilde{V}_1(t) \tilde{V}_1(t') \tilde{\chi}(t') - \tilde{V}_1(t') \tilde{\chi}(t') \tilde{V}_2(t) - \tilde{V}_1(t) \tilde{\chi}(t') \tilde{V}_2(t') + \tilde{\chi}(t') \tilde{V}_2(t') \tilde{V}_2(t) \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Eine kompakte Schreibweise für dieses Ergebnis ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\chi}(t) = \mathcal{L}_t [\chi(0)] + \int_0^t dt' \mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t'} [\tilde{\chi}(t')] \quad (4.12)$$

$$\mathcal{L}_t [A] \equiv -i \left(\tilde{V}_1(t) A - A \tilde{V}_2(t) \right), \quad \text{Liouville-Superoperator.} \quad (4.13)$$

4.1.1 Reduzierte Dichtematrix

Im Folgenden nehmen wir eine Zerlegung des gesamten Hilbertraums \mathcal{H} in einen System- und einen Bad-Anteil an,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B. \quad (4.14)$$

Die verallgemeinerte reduzierte Dichtematrix $\rho(t)$ des Systems erhalten wir durch die partielle Spur

$$\rho(t) \equiv \text{Tr}_B \chi(t). \quad (4.15)$$

Für eine entsprechende Zerlegung des ungestörten Hamiltonians

$$H_0 = H_S + H_B \quad (4.16)$$

in System- und Badanteil folgt im Wechselwirkungsbild

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B[\tilde{\chi}(t)] &= \text{Tr}_B e^{iH_0 t} \chi(t) e^{-iH_0 t} \\ &= e^{iH_S t} (\text{Tr}_B e^{iH_B t} \chi(t) e^{-iH_B t}) e^{-iH_S t} = e^{iH_S t} \rho(t) e^{-iH_S t} \\ &\equiv \tilde{\rho}(t). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Das Wechselwirkungsbild $\tilde{\rho}(t)$ involviert hierbei nur den *System*-Hamiltonian H_S und nicht H_0 ,

$$\tilde{\rho}(t) \equiv e^{iH_S t} \rho(t) e^{-iH_S t}. \quad (4.18)$$

Für Systemoperatoren

$$\tilde{A}_S(t) \equiv e^{iH_0 t} A_S e^{-iH_0 t} = e^{iH_S t} A_S e^{-iH_S t} \quad (4.19)$$

können wir Erwartungswerte wie folgt berechnen;

$$\begin{aligned} \langle A_S \rangle_t &\equiv \text{Tr}_{\text{total}}[\chi(t) A_S] \\ &= \text{Tr}_S [\text{Tr}_B \chi(t)] A_S = \text{Tr}_S [\rho(t) A_S] = \text{Tr}_S [\tilde{\rho}(t) \tilde{A}_S(t)]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Das sind ‘echte’ Erwartungswerte im Sinne einer unitären Zeitentwicklung des Gesamtsystems für $V_1 = V_2$, d.h. identischen Hamiltonians für Vorwärts- und Rückwärtszeitentwicklung.

Die Bewegungsgleichung der reduzierten Dichtematrix folgt jetzt durch Spurbildung von Gl. (4.12),

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = \text{Tr}_B \mathcal{L}_t [\chi(0)] + \int_0^t dt' \text{Tr}_B \mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t'} [\tilde{\chi}(t')]. \quad (4.21)$$

Bis hierhin ist noch alles exakt.

4.1.2 Faktorisierung und Bornsche Näherung

Zur Zeit $t = 0$ wird eine faktorisierende Anfangsbedingung angenommen;

$$\begin{aligned}\chi(t=0) &= R_0 \otimes \rho(t=0) \\ R_0 &\equiv \text{Tr}_S[\chi(t=0)], \quad \rho(t=0) \equiv \text{Tr}_B[\chi(t=0)].\end{aligned}\quad (4.22)$$

Die Faktorisierung wird einen Einfluss auf die Ergebnisse zu kurzen Zeiten t haben. Ob sie auch für lange Zeiten t einen Einfluss hat oder nicht, hängt vom jeweiligen Problem ab und kann nicht generell entschieden werden.

In niedrigster Ordnung in der Wechselwirkung $V_{1/2}$ ist im Wechselwirkungsbild weiterhin

$$\tilde{\chi}(t') = R_0 \otimes \tilde{\rho}(t=0), \quad \text{nullte Ordnung.} \quad (4.23)$$

Andererseits ist die rechte Seite von Gl. (4.21) bereits von *zweiter* Ordnung in der Wechselwirkung $V_{1/2}$. Die Bornsche Näherung für die Bewegungsgleichung Gl. (4.21) lautet deshalb

$$\tilde{\chi}(t') \approx R_0 \otimes \tilde{\rho}(t'), \quad \text{Bornsche Näherung in r.S. von Gl. (4.21).} \quad (4.24)$$

Man nimmt also zu allen Zeiten $t' > 0$ in niedrigster Ordnung in der System–Bad–Wechselwirkung einen faktorisierenden Zustand an. Physikalisch sollte das eine gute Näherung sein, wenn die Rückwirkung auf das Bad vernachlässigt werden kann und das Bad tatsächlich immer im selben Zustand R_0 bleibt, für den man häufig einen thermischen Gleichgewichtszustand

$$R_0 = \frac{e^{-\beta H_B}}{\text{Tr} e^{-\beta H_B}} \quad (4.25)$$

wählt. Damit erhält man eine geschlossene Integro-Differentialgleichung für die verallgemeinerte reduzierte Dichtematrix $\tilde{\rho}(t)$ im Wechselwirkungsbild;

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = \text{Tr}_B \mathcal{L}_t [R_0 \otimes \rho(0)] + \int_0^t dt' \text{Tr}_B \mathcal{L}_t \mathcal{L}_{t'} [R_0 \otimes \tilde{\rho}(t')]. \quad (4.26)$$

4.1.3 Zerlegung

Für die Kopplung zwischen System und Umgebung nehmen wir jetzt folgende allgemeine Form (CARMICHAEL, BREUER/PETRUCCIONE)

$$V_1 = \sum_k S_k^1 \otimes B_k^1, \quad V_2 = \sum_k S_k^2 \otimes B_k^2 \quad (4.27)$$

mit System- und Badoperatoren. Damit wird aus den einzelnen Termen in der Mastergleichung (Tilde hier aus Notationsgründen für einen Moment weglassen)

$$\begin{aligned} -\mathrm{Tr}_B V_1(t) V_1(t') R_0 \rho(t') &= -\sum_{kl} \mathrm{Tr}_B S_k^1(t) B_k^1(t) S_l^1(t') B_l^1(t') R_0 \rho(t') \\ &= -\sum_{kl} C_{kl}^{11}(t, t') S_k^1(t) S_l^1(t') \rho(t') \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_B V_1(t') R_0 \rho(t') V_2(t) &= \sum_{kl} \mathrm{Tr}_B S_k^1(t') B_k^1(t') R_0 \rho(t') S_l^2(t) B_l^2(t) \\ &= \sum_{kl} C_{lk}^{21}(t, t') S_k^1(t') \rho(t') S_l^2(t) \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_B V_1(t) R_0 \rho(t') V_2(t') &= \sum_{kl} \mathrm{Tr}_B S_k^1(t) B_k^1(t) R_0 \rho(t') S_l^2(t') B_l^2(t') \\ &= \sum_{kl} C_{lk}^{21}(t', t) S_k^1(t) \rho(t') S_l^2(t') \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} -\mathrm{Tr}_B R_0 \rho(t') V_2(t') V_2(t) &= -\sum_{kl} \mathrm{Tr}_B R_0 \rho(t') S_k^2(t') B_k^2(t') S_l^2(t) B_l^2(t) \\ &= -\sum_{kl} C_{kl}^{22}(t', t) \rho(t') S_k^2(t') S_l^2(t), \end{aligned} \quad (4.31)$$

wobei

$$C_{kl}^{jj'}(t, t') \equiv \mathrm{Tr}_B \rho_B \tilde{B}_k^j(t) \tilde{B}_l^{j'}(t'), \quad \text{Bad-Korrelationsfunktion.} \quad (4.32)$$

Im Folgenden nehmen wir an, dass die Erwartungswerte der einzelnen Badoperatoren verschwinden;

$$\mathrm{Tr}_B R_0 \tilde{B}_k^1(t) = 0. \quad (4.33)$$

Dann wird die Mastergleichung im Wechselwirkungsbild in Bornscher Näherung zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) &= -\int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{kl}^{11}(t, t') \tilde{S}_k^1(t) \tilde{S}_l^1(t') \tilde{\rho}(t') + C_{kl}^{22}(t', t) \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_k^2(t') \tilde{S}_l^2(t) \right) \\ &\quad + \int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{lk}^{21}(t, t') \tilde{S}_k^1(t') \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_l^2(t) + C_{lk}^{21}(t', t) \tilde{S}_k^1(t) \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_l^2(t') \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Dieses Ergebnis ist bis zur zweiten Ordnung noch exakt.

4.1.4 Direkter Markovscher Limes

Im Folgenden beginnen wir mit unserer allgemeinen Form Gl. (4.34), diesmal ohne die Verallgemeinerung verschiedener $V_{1/2}$, also ohne obere Indizes an den Badkorrelations-

funktionen und Systemoperatoren;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) &= - \int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{kl}(t, t') \tilde{S}_k(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(t') + C_{kl}(t', t) \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(t) \right) \\ &+ \int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{lk}(t, t') \tilde{S}_k(t') \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_l(t) + C_{lk}(t', t) \tilde{S}_k(t) \tilde{\rho}(t') \tilde{S}_l(t') \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

In der *Markov-Näherung* nehmen wir an, dass die Bad-Korrelationsfunktion $C_{kl}(\tau)$ stark um $\tau \equiv t - t' = 0$ gepeakt ist mit einer Breite $\delta\tau \ll \gamma^{-1}$, wobei γ eine typische Rate für die Änderung von $\tilde{\rho}(t')$ im Wechselwirkungsbild bezeichne. Die Bedingung $\delta\tau \ll \gamma^{-1}$ kann naturgemäß erst nach der Lösung der Bewegungsgleichung kontrolliert werden.

Im Wechselwirkungsbild ersetzen wir nun

$$\tilde{\rho}(t') \rightarrow \tilde{\rho}(t) \quad (4.36)$$

unter dem Integral und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= - \int_0^t dt' \sum_{kl} \left[C_{kl}(t - t') \left\{ \tilde{S}_k(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(t) - \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_k(t) \right\} \right. \\ &\left. + C_{lk}(t' - t) \left\{ \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{S}_k(t) - \tilde{S}_k(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Wichtig ist, dass diese Näherung im WW-Bild (und nicht im Schrödingerbild) ausgeführt wird, weil im WW-Bild die schnellen Anteile der Dynamik durch die freie Zeitentwicklung mit H_s wegtransformiert sind.

Wir können nun in das Schrödinger-Bild zurücktransformieren,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= i[H_S, \tilde{\rho}(t)] + e^{iH_S t} \frac{d}{dt} \rho(t) e^{-iH_S t} \\ \rightsquigarrow \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i[H_S, \rho(t)] + e^{-iH_S t} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) e^{iH_S t} \end{aligned} \quad (4.38)$$

was auf folgende Form führt;

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i[H_S, \rho(t)] \\ &- \int_0^t dt' \sum_{kl} \left[C_{kl}(t - t') \left\{ e^{-iH_S t} \tilde{S}_k(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(t) - \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_k(t) \right\} e^{iH_S t} \right. \\ &+ C_{lk}(t' - t) \left\{ e^{-iH_S t} \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{S}_k(t) - \tilde{S}_k(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') \right\} e^{iH_S t} \left. \right] \\ &= -i[H_S, \rho(t)] \\ &- \int_0^t dt' \sum_{kl} \left[C_{kl}(t - t') \left\{ S_k \tilde{S}_l(t' - t) \rho(t) - \tilde{S}_l(t' - t) \rho(t) S_k \right\} \right. \\ &+ C_{lk}(t' - t) \left\{ \rho(t) \tilde{S}_l(t' - t) S_k - S_k \rho(t) \tilde{S}_l(t' - t) \right\} \left. \right]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

In einem zweiten Schritt wird jetzt die Integration über t' durch eine Integration bis $t = \infty$ ersetzt, was mit der obigen Annahme gepeakter Korrelationsfunktionen konsistent ist und die Rechnung vereinfacht. Mit den Definitionen

$$D_k \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \sum_l C_{kl}(\tau) \tilde{S}_l(-\tau), \quad E_k \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \sum_l C_{lk}(-\tau) \tilde{S}_l(-\tau), \quad (4.40)$$

schreiben wir dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i[H_S, \rho(t)] \\ &- \sum_k \left[S_k D_k \rho(t) - D_k \rho(t) S_k + \rho(t) E_k S_k - S_k \rho(t) E_k \right]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Diese allgemeine *Markovsche Form* der Mastergleichung ist zeitlokal und erhält die Spur der Dichtematrix, wie man sofort durch Spurbildung feststellt. Allerdings ist hier die *Positivität* der reduzierten Dichtematrix $\rho(t)$ für alle Zeiten t noch nicht sichergestellt. Die Verletzung der Positivität kann z.B. zu negativen Wahrscheinlichkeiten führen. Wenn man diesen Nachteil ausmerzen möchte, muss eine weitere Näherung (*Sekulärnäherung*) durchgeführt werden, die dann zur *Lindblad-Form* der Mastergleichung führt.

Bevor wir mit dieser allgemeinen Diskussion (Markov-Limes, Lindblad-Form etc.) fortfahren, betrachten wir aber ausführlich ein Beispiel.

4.2 Die Mastergleichung für das Einniveausystem

Wir betrachten wieder einen Tunnel-Hamiltonian der Form

$$\hat{\mathcal{H}}_j \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}_j, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} + \hat{\mathcal{H}}_d \quad (4.42)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_d \equiv \varepsilon_0 d^\dagger d, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{res}} \equiv \sum_l \varepsilon_l c_l^\dagger c_l, \quad \hat{\mathcal{V}}_j \equiv \sum_l \left(V_{jl} c_l^\dagger d + \bar{V}_{jl} d^\dagger c_l \right), \quad j = 1, 2. \quad (4.43)$$

Hierbei indiziert $j = 1, 2$ den Hin/Rückweg in der Zeitentwicklung mit verschiedenen $\hat{\mathcal{H}}_j$. Damit wollen wir möglichst allgemeine Fälle für die Zählstatistik erfassen (s.u.) Wir haben

$$S_1^j = d, \quad S_2^j = d^\dagger, \quad B_1^j = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^j c_{k\alpha}^\dagger, \quad B_2^j = \sum_{k\alpha} \bar{V}_{k\alpha}^j c_{k\alpha} \quad (4.44)$$

$$C_{12}^{jj'}(t-t') = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^j \bar{V}_{k\alpha}^{j'} f_{k\alpha} e^{i\varepsilon_{k\alpha}(t-t')} \quad (4.45)$$

$$C_{21}^{jj'}(t-t') = \sum_{k\alpha} \bar{V}_{k\alpha}^j V_{k\alpha}^{j'} (1 - f_{k\alpha}) e^{-i\varepsilon_{k\alpha}(t-t')}. \quad (4.46)$$

Weiterhin ist

$$2\pi \sum_k V_{k\alpha}^j \bar{V}_{k\alpha}^{j'} \delta(\omega - \varepsilon_{k\alpha}) \equiv \Gamma_\alpha^{jj'}(\omega) \quad (4.47)$$

$$C_{12}^{jj'}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{jj'}(\omega) f_\alpha(\omega) e^{i\omega(t-t')} \quad (4.48)$$

$$C_{21}^{jj'}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{j'j}(\omega) (1 - f_\alpha(\omega)) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (4.49)$$

Mit dieser Form kann die Mastergleichung jetzt durch Laplace-Transformation ohne weitere Approximationen gelöst werden (SKRIPT CLIVE EMARY 2007).

4.2.1 Exakter Markov-Limes

Eine Vereinfachung, die auch im Folgenden und für fast alle weiteren Anwendungen sehr wichtig ist, besteht in einer weiteren Approximation, die als *Markov-Limes* bezeichnet wird. In unserem Tunnelmodell wird dieser Limes exakt erreicht durch die Annahmen

$$\begin{aligned} \Gamma_\alpha^{jj'}(\omega) &\equiv \Gamma_\alpha^{jj'} = \text{const}, & \text{konstante (verallgemeinerte) Tunnelraten} \\ f_\alpha(\omega) &= \delta_{\alpha,L}, & \text{unendliche Spannung zwischen Reservoir } L \text{ und } R. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Dann werden die Bad-Korrelationsfunktionen zu Delta-Funktionen

$$C_{12}^{jj'}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_L^{jj'} e^{i\omega(t-t')} = \Gamma_L^{jj'} \delta(t-t') \quad (4.51)$$

$$C_{21}^{jj'}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_R^{j'j} e^{-i\omega(t-t')} = \Gamma_R^{j'j} \delta(t-t'), \quad (4.52)$$

mit denen die rechte Seite der Mastergleichung sofort ausgerechnet werden kann. Hier sind also die Fermifunktionen gar nicht mehr vorhanden, sondern einfach durch Null bzw. Eins ersetzt.

4.2.2 Ratengleichung in Markov-Näherung

Wenn wir die Teilchen im Reservoir α zählen, ist nach Gl. (3.99)

$$\hat{\mathcal{V}}_1 = \hat{\mathcal{V}}_\lambda = \sum_k V_{kR} e^{i\frac{\lambda R}{2}} c_{kR}^\dagger d + V_{kL} e^{i\frac{\lambda L}{2}} c_{kL}^\dagger d + H.c. \quad (4.53)$$

$$\hat{\mathcal{V}}_2 = \hat{\mathcal{V}}_{-\lambda} = \sum_k V_{kR} e^{-i\frac{\lambda R}{2}} c_{kR}^\dagger d + V_{kL} e^{-i\frac{\lambda L}{2}} c_{kL}^\dagger d + H.c. \quad (4.54)$$

Damit ist also

$$V_{k\alpha}^1 = V_{k\alpha} e^{i\frac{\lambda\alpha}{2}}, \quad V_{k\alpha}^2 = V_{k\alpha} e^{-i\frac{\lambda\alpha}{2}}, \quad \bar{V}_{k\alpha}^{j'} = (V_{k\alpha}^{j'})^* \quad (4.55)$$

$$\rightsquigarrow \Gamma_\alpha^{jj} = \Gamma_\alpha, \quad \Gamma_\alpha^{12} = e^{i\lambda\alpha} \Gamma_\alpha, \quad \Gamma_\alpha^{21} = e^{-i\lambda\alpha} \Gamma_\alpha. \quad (4.56)$$

Statt eine unendliche Spannung zwischen linkem und rechtem Reservoir anzunehmen (wo die Markov-Naherung exakt wird), approximieren wir jetzt die Bad-Korrelationsfunktionen in

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) &= - \int_0^t dt' \left(C_{12}^{11}(t, t') e^{-i\varepsilon_0(t-t')} dd^\dagger \tilde{\rho}(t') + C_{21}^{11}(t, t') e^{i\varepsilon_0(t-t')} d^\dagger d \tilde{\rho}(t') \right) \\
&- \int_0^t dt' \left(C_{12}^{22}(t, t') \tilde{\rho}(t') e^{-i\varepsilon_0(t-t')} dd^\dagger + C_{21}^{22}(t, t') e^{i\varepsilon_0(t-t')} \tilde{\rho}(t') d^\dagger d \right) \\
&+ \int_0^t dt' \left(C_{12}^{21}(t, t') e^{-i\varepsilon_0(t-t')} d^\dagger \tilde{\rho}(t') d + C_{21}^{21}(t, t') e^{i\varepsilon_0(t-t')} d \tilde{\rho}(t') d^\dagger \right) \\
&+ \int_0^t dt' \left(C_{12}^{21}(t', t) e^{i\varepsilon_0(t-t')} d^\dagger \tilde{\rho}(t') d + C_{21}^{21}(t', t) e^{-i\varepsilon_0(t-t')} d \tilde{\rho}(t') d^\dagger \right), \quad (4.57)
\end{aligned}$$

und zwar durch

$$\begin{aligned}
C_{12}^{jj'}(t, t') e^{-i\varepsilon_0(t-t')} &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{jj'}(\omega) f_\alpha(\omega) e^{i(\omega-\varepsilon_0)(t-t')} \\
&\rightarrow \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{jj'} f_\alpha \delta(t-t'), \quad f_\alpha \equiv f_\alpha(\varepsilon_0) \quad (4.58)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{21}^{jj'}(t, t') e^{i\varepsilon_0(t-t')} &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{j'j}(\omega) (1 - f_\alpha(\omega)) e^{-i(\omega-\varepsilon_0)(t-t')} \\
&\rightarrow \sum_\alpha \Gamma_\alpha^{j'j} (1 - f_\alpha) \delta(t-t'). \quad (4.59)
\end{aligned}$$

Hierbei werden also die Fermi-Funktionen an der Energie ε_0 des Dot-Levels ausgewertet. DISKUSSION. Bei der Auswertung mussen wir auf $\int_0^t dt' \delta(t-t') f(t') = \frac{1}{2} f(t)$ achten und erhalten dann die explizite Form

$$\dot{\rho}(t) = \sum_\alpha \Gamma_\alpha f_\alpha \left(-\frac{1}{2} dd^\dagger \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) dd^\dagger + e^{-i\lambda_\alpha} d^\dagger \rho(t) d \right) \quad (4.60)$$

$$+ \sum_\alpha \Gamma_\alpha (1 - f_\alpha) \left(-\frac{1}{2} d^\dagger d \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) d^\dagger d + e^{i\lambda_\alpha} d \rho(t) d^\dagger \right). \quad (4.61)$$

Diese Form schreiben wir als

$$\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}_0 \rho(t) + \sum_{\alpha, \pm} e^{\pm i\lambda_\alpha} \mathcal{J}_\alpha^\pm \rho(t) \quad (4.62)$$

$$\mathcal{L}_0 \rho \equiv - \sum_\alpha \Gamma_\alpha \left(f_\alpha \{ dd^\dagger, \rho \} + (1 - f_\alpha) \{ d^\dagger d, \rho \} \right) \quad (4.63)$$

$$\mathcal{J}_\alpha^+ \rho \equiv \Gamma_\alpha (1 - f_\alpha) d \rho d^\dagger, \quad \mathcal{J}_\alpha^- \rho \equiv \Gamma_\alpha f_\alpha d^\dagger \rho d, \quad \text{Sprung-Superoperatoren.} \quad (4.64)$$

4.2.3 Matrixdarstellung

Für praktische Berechnungen ist eine explizite Matrixdarstellung der Mastergleichung sehr nützlich. Der Ausgangspunkt sind hier die Systemzustände $|\alpha\rangle$, in unserem Beispiel also einfach die Zustände

$$|\alpha\rangle = |0\rangle, \quad \text{unbesetztes Niveau} \quad (4.65)$$

$$|\alpha\rangle = |1\rangle, \quad \text{besetztes Niveau} . \quad (4.66)$$

Diese Zustände sind eine vollständige Basis für das System. Wir können in ihr Matrixelemente der Mastergleichung nehmen unter Beachtung von

$$d|0\rangle = 0, \quad d|1\rangle = |0\rangle \rightsquigarrow d = |0\rangle\langle 1|, \quad d^\dagger = |1\rangle\langle 0|. \quad (4.67)$$

Matrixelemente der Superoperatoren sind dann

$$\langle 0|\mathcal{L}_0\rho|0\rangle = -\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}f_{\alpha}\langle 0|\rho|0\rangle, \quad \langle 0|\mathcal{L}_0\rho|1\rangle = -\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}\langle 0|\rho|1\rangle, \quad (4.68)$$

$$\langle 1|\mathcal{L}_0\rho|1\rangle = -\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}(1-f_{\alpha})\langle 1|\rho|1\rangle, \quad \langle 1|\mathcal{L}_0\rho|0\rangle = -\sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha}\langle 1|\rho|0\rangle \quad (4.69)$$

für den Term $\mathcal{L}_0\rho$. Die Sprungoperatoren haben die Darstellung

$$\mathcal{J}_{\alpha}^{+}\rho = \Gamma_{\alpha}(1-f_{\alpha})|0\rangle\langle 1|\rho|1\rangle\langle 0|, \quad \mathcal{J}_{\alpha}^{-}\rho = \Gamma_{\alpha}f_{\alpha}|1\rangle\langle 0|\rho|0\rangle\langle 1| \quad (4.70)$$

und sind also diagonal. Hier erklärt sich auch der Name ‘Sprungoperator’: durch Anwendung von \mathcal{J}_{α}^{+} wird ein Zustand ρ in $\Gamma_{\alpha}(1-f_{\alpha})p_1|0\rangle\langle 0|$ transformiert, also den Leerzustand $|0\rangle\langle 0|$ multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit p_1 , das Niveau besetzt zu finden, und der Rate $\Gamma_{\alpha}(1-f_{\alpha})$ für den Transfer in das Reservoir α . Entsprechend wird durch Anwendung von \mathcal{J}_{α}^{-} wird ein Zustand ρ in $\Gamma_{\alpha}f_{\alpha}p_0|1\rangle\langle 1|$ transformiert, also den besetzten Zustand $|1\rangle\langle 1|$ multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit p_0 , das Niveau leer zu finden, und der Rate $\Gamma_{\alpha}f_{\alpha}$ für den Transfer aus dem Reservoir α heraus. Hier wird auch die Bedeutung der Fermifunktionen $f_{\alpha}(\varepsilon_0)$ klar, die die ‘nackten’ Tunnelraten Γ_{α} multiplizieren und den Effekt der Reservoirbesetzung beschreiben.

Definition Der Faktor $1-f_{\alpha}$ wird als *Pauli-Blockfaktor* bezeichnet.

In besetzte Zustände kann nämlich nach dem Pauliprinzip nicht hineingetunnelt werden.

Wir führen jetzt die Vektor/Matrixschreibweise

$$\frac{\partial}{\partial t}|\rho\rangle \equiv \mathcal{L}|\rho\rangle, \quad |\rho\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle 0|\rho|0\rangle \\ \langle 1|\rho|1\rangle \\ \langle 0|\rho|1\rangle \\ \langle 1|\rho|0\rangle \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L_c \end{pmatrix} \quad (4.71)$$

$$L \equiv \sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha} \begin{pmatrix} -f_{\alpha} & e^{i\lambda_{\alpha}}(1-f_{\alpha}) \\ e^{-i\lambda_{\alpha}}f_{\alpha} & -(1-f_{\alpha}) \end{pmatrix}, \quad L_c \equiv \sum_{\alpha}\Gamma_{\alpha} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ein. Insbesondere entkoppeln hier die *Besetzungen* $p_0 \equiv \langle 0|\rho|0\rangle$ ('leer'), $p_1 \equiv \langle 1|\rho|1\rangle$ ('voll') von den *Kohärenzen*, d.h. den Ausserdiagonaltermen der Dichtematrix. Letztere erfüllen in der Tat triviale entkoppelte Bewegungsgleichungen, die ein exponentielle Dämpfen einer anfänglichen Kohärenz beschreiben.

Im Unterraum der Besetzungen hat man also ein 2×2 -System

$$\frac{\partial}{\partial t}|p\rangle\rangle = L|p\rangle\rangle, \quad |p\rangle\rangle \equiv \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \end{pmatrix}, \quad (4.72)$$

von gewöhnlichen Differentialgleichungen.

4.2.4 Dichtematrix und Zählstatistik

Zur Interpretation der Zählfelder λ_α schreiben wir allgemein eine Mastergleichung der Form Gl. (4.62) als

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}_0\rho + \mathcal{J}\rho, \quad \mathcal{J} \equiv \sum_{k=1}^M e^{i\lambda_k} \mathcal{J}_k\rho \quad (4.73)$$

mit M Sprungoperatoren \mathcal{J}_k . Wir können das formal wie folgt lösen;

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(t) &\equiv e^{-\mathcal{L}_0 t} \rho(t), \quad \bar{\mathcal{J}}_1(t) \equiv e^{-\mathcal{L}_0 t} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t} & (4.74) \\ \rightsquigarrow \frac{d}{dt} \bar{\rho}(t) &= -\mathcal{L}_0 \bar{\rho}(t) + e^{-\mathcal{L}_0 t} (\mathcal{L}_0 + \mathcal{J}) e^{\mathcal{L}_0 t} \bar{\rho}(t) = \bar{\mathcal{L}}_1(t) \bar{\rho}(t) \\ \rightsquigarrow \bar{\rho}(t) &= \rho(0) + \int_0^t dt_1 \bar{\mathcal{J}}(t_1) \bar{\rho}(t_1) \\ &= \rho(0) + \int_0^t dt_1 \bar{\mathcal{J}}(t_1) \rho(0) + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \bar{\mathcal{J}}(t_1) \bar{\mathcal{J}}(t_2) \bar{\rho}(t_2) \\ &\dots \\ &= \rho(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \dots \int_0^{t_2} dt_1 \bar{\mathcal{J}}(t_n) \dots \bar{\mathcal{J}}(t_1) \rho(0). \end{aligned} \quad (4.75)$$

Rücktransformation auf $\rho(t)$ liefert

$$\begin{aligned} \rho(t) &= e^{\mathcal{L}_0 t} \rho(0) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \dots \int_0^{t_2} dt_1 e^{\mathcal{L}_0 t} e^{-\mathcal{L}_0 t_n} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t_n} e^{-\mathcal{L}_0 t_{n-1}} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t_{n-1}} \dots e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t_1} \rho(0) \\ &= e^{\mathcal{L}_0 t} \rho(0) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \dots \int_0^{t_2} dt_1 \underline{e^{\mathcal{L}_0(t-t_n)} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0(t_n-t_{n-1})} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0(t_{n-1}-t_{n-2})} \dots e^{\mathcal{L}_0(t_2-t_1)} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t_1} \rho(0)} \\ &\equiv e^{\mathcal{L}_0 t} \rho(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \dots \int_0^{t_2} dt_1 \underline{\rho_c(t; t_1, \dots, t_n)}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

wo wir eine nicht–normierte, *konditionierte verallgemeinerte Dichtematrix* $\rho_c(t; t_1, \dots, t_n)$ definiert haben, die im Zeitintervall $[0, t]$ insgesamt n ‘Quantensprünge’ zu Zeiten $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n \leq t$ beschreibt. In der Tat beschreibt die Operation $e^{\mathcal{L}\tau}\rho$ ja eine nicht von Sprüngen (Sprungoperatoren) unterbrochene Zeitentwicklung eines Anfangszustands ρ über die Periode τ . Die (verallgemeinerte) System-Dichtematrix $\rho(t)$ zur Zeit t ist dann die Summe über alle *Trajektorien* mit $n = 0, \dots, \infty$ Unterbrechungen, von den jede einem der $k = 1, \dots, M$ Sprungoperatoren \mathcal{J}_k zugeordnet ist.

Da diese Zuordnung über die Zählfelder $e^{i\lambda_k}$ vor dem jeweiligen Sprungoperator \mathcal{J}_k erfasst wird, können wir durch Fouriertransformation Trajektorien herausprojizieren. Wir definieren hierzu

$$\rho^{n_1, \dots, n_M}(t) \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda_1}{2\pi} e^{-i\lambda_1 n_1} \dots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\lambda_M}{2\pi} e^{-i\lambda_M n_M} \rho(\{\lambda_k\}; t), \quad n\text{-aufgelöste Dichtematrix} \quad (4.77)$$

wobei wir jetzt explizit die Zählfelder in der (verallgemeinerten) Dichtematrix anzeigen. Entsprechend interpretieren wir die Spur

$$P(n_1, \dots, n_M; t) \equiv \text{Tr} \rho^{n_1, \dots, n_M}(t) \quad (4.78)$$

als die Wahrscheinlichkeit, dass im Zeitintervall $[0, t]$ insgesamt n_k Sprünge vom Typ k stattfinden. Die Momenten-erzeugenden Funktion zu dieser Wahrscheinlichkeit ist damit

$$\begin{aligned} g_t(\lambda_1, \dots, \lambda_M) &\equiv \sum_{n_1 \dots n_M = 0}^{\infty} e^{i(\lambda_1 n_1 + \dots + \lambda_M n_M)} \text{Tr} \rho^{n_1, \dots, n_M}(t) \quad (4.79) \\ &= \text{Tr} \rho(\{\lambda_k\}; t) = \text{Tr} e^{\mathcal{L}(\{\lambda_k\})t} \rho(0). \quad (4.80) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir hier die formale Lösung von Gl. (4.73) eingesetzt.

4.3 The damped harmonic oscillator

(SKRIPT STATISTISCHE MECHANIK I, 2007). In the following, we will discuss two models for damped harmonic oscillators and derive the explicit forms for the corresponding Master equations.

The model Hamiltonian is defined by

$$\begin{aligned} H_{\text{total}} &\equiv H_S + H_{SB} + H_B \\ &= \Omega a^\dagger a + \sum_Q \gamma_Q (a_Q + a_Q^\dagger)(a + a^\dagger) + \sum_Q \omega_Q a_Q^\dagger a_Q, \quad \text{non-RWA mode} \end{aligned} \quad (4.81)$$

Here, $V \equiv H_{SB} = S \otimes B$ with $S = a + a^\dagger$ and $B = \sum_Q \gamma_Q (a_Q + a_Q^\dagger)$. The indices k and l play no role here.

Often one starts straight away with a simplified model Hamiltonian in Rotating Wave Approximation (RWA)

$$\begin{aligned} H_{\text{total}} &\equiv H_S + H_{SB} + H_B \\ &= \Omega a^\dagger a + \sum_Q \gamma_Q (a_Q a^\dagger + a_Q^\dagger a) + \sum_Q \omega_Q a_Q^\dagger a_Q, \quad \text{RWA model.} \end{aligned} \quad (4.82)$$

Here, $V \equiv H_{SB} = \sum_{i=1,2} S_i \otimes B_i$ with $S_1 = a^\dagger$, $S_2 = a$, and $B_1 = \sum_Q \gamma_Q a_Q$, $B_2 = \sum_Q \gamma_Q a_Q^\dagger$. The indices k and l now do play a role.

We first derive the master equation for the RWA model.

4.3.1 Rates and Energy Shift (RWA)

The bath correlation functions simply are

$$\begin{aligned}
C_{12}(t) &\equiv \text{Tr}_B [\tilde{B}_1(t) B_2 R_0] = \text{Tr}_B \left[\sum_{QQ'} \gamma_Q \gamma_{Q'} a_Q e^{-i\omega_Q t} a_{Q'}^\dagger R_0 \right] \\
&= \sum_Q \gamma_Q^2 e^{-i\omega_Q t} (1 + n_B(\omega_Q)) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) e^{-i\omega t} (1 + n_B(\omega)) \\
C_{21}(t) &\equiv \text{Tr}_B [\tilde{B}_2(t) B_1 R_0] = \text{Tr}_B \left[\sum_{QQ'} \gamma_Q \gamma_{Q'} a_Q^\dagger e^{i\omega_Q t} a_{Q'} R_0 \right] \\
&= \sum_Q \gamma_Q^2 e^{i\omega_Q t} n_B(\omega_Q) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) e^{i\omega t} n_B(\omega) \\
C_{11}(t) &= C_{22}(t) = 0,
\end{aligned} \tag{4.83}$$

where all the information on the microscopic coupling to the bath is now comprised within one single function, the bath *spectral density* $\rho(\omega)$

$$\rho(\omega) \equiv \sum_Q \gamma_Q^2 \delta(\omega_Q - \omega). \tag{4.84}$$

Using $\tilde{S}_1(t) = a^\dagger e^{i\Omega t}$, $\tilde{S}_2(t) = a e^{-i\Omega t}$, we have

$$\begin{aligned}
D_1 &\equiv \int_0^\infty d\tau C_{12}(\tau) \tilde{S}_2(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C_{12}(\tau) a e^{i\Omega \tau} = \hat{C}_{12}(-i\Omega) a \\
D_2 &\equiv \int_0^\infty d\tau C_{21}(\tau) \tilde{S}_1(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C_{21}(\tau) a^\dagger e^{-i\Omega \tau} = \hat{C}_{21}(i\Omega) a^\dagger \\
E_1 &\equiv \int_0^\infty d\tau C_{21}^*(\tau) \tilde{S}_2(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C_{21}^*(\tau) a e^{i\Omega \tau} = [\hat{C}_{21}(i\Omega)]^* a = D_2^\dagger \\
E_2 &\equiv \int_0^\infty d\tau C_{12}^*(\tau) \tilde{S}_1(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C_{12}^*(\tau) a^\dagger e^{-i\Omega \tau} = [\hat{C}_{12}(-i\Omega)]^* a^\dagger = D_1^\dagger
\end{aligned} \tag{4.85}$$

Here, we defined the Laplace transformation of a function $f(t)$,

$$\hat{f}(z) = \int_0^\infty dt e^{-zt} f(t). \tag{4.86}$$

The Master equation therefore is

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[\Omega a^\dagger a, \rho(t)] \\
&- \sum \left\{ S_k D_k \rho(t) - D_k \rho(t) S_k + \rho(t) E_k S_k - S_k \rho(t) E_k \right\} \\
&= -i[\Omega a^\dagger a, \rho(t)] \\
&- \left\{ \left[\hat{C}_{12}(-i\Omega) a^\dagger a + \hat{C}_{21}(i\Omega) a a^\dagger \right] \rho(t) + \rho(t) \left[[\hat{C}_{21}(i\Omega)]^* a a^\dagger + [\hat{C}_{12}(-i\Omega)]^* a^\dagger a \right] \right. \\
&- \left. \hat{C}_{12}(-i\Omega) a \rho(t) a^\dagger - \hat{C}_{21}(i\Omega) a^\dagger \rho(t) a - [\hat{C}_{21}(i\Omega)]^* a^\dagger \rho(t) a - [\hat{C}_{12}(-i\Omega)]^* a \rho(t) a^\dagger \right\}.
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Let us have a closer look at the expressions

$$\hat{C}_{12}(z) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) [1 + n_B(\omega)] \int_0^\infty dt e^{-(z+i\omega)t}. \tag{4.88}$$

The Laplace transform exists for $\text{Im}(z) > 0$ to ensure convergence of the integral, but in the expressions above we need $\hat{C}_{12}(z = -i\Omega)$ etc., i.e. purely imaginary arguments! The limit $t \rightarrow \infty$, if explicitly written, reads

$$\hat{C}_{12}(z = -i\Omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) [1 + n_B(\omega)] \int_0^t dt' e^{i(\Omega-\omega)t'}. \tag{4.89}$$

Now,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t dt' e^{ixt'} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{\sin xt}{x} + i \frac{1 - \cos xt}{x} \right] = \pi \delta(x) + iP \left(\frac{1}{x} \right), \tag{4.90}$$

where P denotes the principal value.

For the first term, we used the very useful

Satz 5. For any integrable, normalised function $f(x)$ with $\int_{-\infty}^\infty dx f(x) = 1$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) = \delta(x). \tag{4.91}$$

Since $\int_{-\infty}^\infty dx \sin(x)/x = \pi$, this yields the Delta function above.

We split the two bath correlation functions into real and imaginary parts,

$$\begin{aligned}
\hat{C}_{12}(-i\Omega) &\equiv \frac{1}{2}\gamma_+ + i\Delta_+, & \hat{C}_{21}(i\Omega) &\equiv \frac{1}{2}\gamma + i\Delta \\
\gamma_+ &\equiv \gamma_+(\Omega) \equiv 2\pi\rho(\Omega)[1 + n_B(\Omega)], & \gamma &\equiv \gamma(\Omega) \equiv 2\pi\rho(\Omega)n_B(\Omega) \\
\Delta_+ &\equiv P \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_+(\omega)}{\Omega - \omega}, & \Delta &\equiv -P \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma(\omega)}{\Omega - \omega}.
\end{aligned} \tag{4.92}$$

Remarks:

- Real and imaginary parts of the correlation functions are related to each other: Kramers-Kronig relations.
- Note the minus-sign in the definition of Δ .

4.3.2 Lindblad Form of RWA-Master Equation

Using these definitions, we can now write

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[\Omega a^\dagger a, \rho(t)] - \frac{1}{2} \left\{ [(\gamma_+ + 2i\Delta_+)a^\dagger a + (\gamma + 2i\Delta)aa^\dagger] \rho(t) \right. \\ &\quad \left. + \rho(t) [(\gamma - 2i\Delta)aa^\dagger + (\gamma_+ - 2i\Delta_+)a^\dagger a] - 2\gamma_+ a \rho(t) a^\dagger - 2\gamma a^\dagger \rho(t) a \right\}. \end{aligned} \quad (4.93)$$

We write $2i\Delta aa^\dagger = 2i\Delta(a^\dagger a + 1)$ and obtain

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[(\Omega + \Delta_+ + \Delta)a^\dagger a, \rho(t)] \\ &\quad - \frac{1}{2}\gamma_+ \left\{ a^\dagger a \rho(t) + \rho(t) a^\dagger a - 2a \rho(t) a^\dagger \right\} - \frac{1}{2}\gamma \left\{ aa^\dagger \rho(t) + \rho(t) aa^\dagger - 2a^\dagger \rho(t) a \right\}. \end{aligned} \quad (4.94)$$

This master equation has *Lindblad-form*;

Definition A master equation has Lindblad-form, if it can be written as

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= \mathcal{L}\rho(t) \equiv -i[\mathcal{H}, \rho(t)] + \mathcal{D}\rho(t) \\ &\equiv -i[\mathcal{H}, \rho(t)] + \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \left(J_{\mu} \rho(t) J_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2} \rho(t) J_{\mu}^{\dagger} J_{\mu} - \frac{1}{2} J_{\mu}^{\dagger} J_{\mu} \rho(t) \right). \end{aligned} \quad (4.95)$$

$$(4.96)$$

Here, \mathcal{H} is an effective system Hamiltonian, the *Lindblad operators* J_{μ} in the *dissipator* \mathcal{D} are system operators, and $\gamma_{\mu} > 0$ are rates.

Lindblad-form master equations have special nice properties that makes them popular for most applications in quantum dissipation:

Satz 6. *Lindblad-form master equations preserve trace and positivity of the reduced density matrix during its time evolution. Lindblad-form generators \mathcal{L} are the most general generators of quantum dynamical semi-groups.*¹

We will discuss Lindblad-forms and their derivation from coarse-graining below.

Our harmonic oscillator master equation can now be further re-arranged into

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i\bar{\Omega}[a^\dagger a, \rho] - \kappa \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a \rho a^\dagger \right\} \\ &\quad - 2\kappa n_B(\Omega) \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a a^\dagger - a \rho a^\dagger - a^\dagger \rho a \right\}, \end{aligned} \quad (4.97)$$

$$(4.98)$$

where

$$\bar{\Omega} \equiv \Omega + P \int_0^\infty d\omega \frac{\rho(\omega)}{\Omega - \omega}, \quad \kappa \equiv \pi \rho(\Omega). \quad (4.99)$$

Remarks

¹ More details can be found in BREUER/PETRUCCIONE.

- This is the ‘standard’ Master equation for the damped harmonic oscillator, as discussed in many text books and used for many applications.
- Modifications appear if one uses the non-RWA model Hamiltonian instead of the RWA Hamiltonian.
- Eq.(4.97) is, of course, not exact because we have used 2nd order perturbation theory (in the system-bath coupling γ_Q), and the Markov approximation.
- The oscillator energy $\hbar\Omega$ is renormalised due to the coupling to the environment. The renormalised frequency $\bar{\Omega}$ is *temperature independent*.
- The integral for the renormalised frequency $\bar{\Omega}$ may diverge, depending on the form of the spectral density $\rho(\omega)$, Eq.(4.84), in which case this theory breaks down. We will make this statement more precise below.
- One can show that the Master equation Eq.(4.97) (and its non-RWA analogon, model 1) is indeed ‘wrong’ in the sense that there is an *exact* solution for the density operator $\rho(t)$ within the same model, which is different from the solution of Eq.(4.97). This again will be discussed below.
- Comparing the exact $\rho(t)$ with that obtained from Eq.(4.97), one could now discuss the ‘validity of the entire Master equation approach’. However, the damped harmonic oscillator is (with very few exceptions) the only quantum dissipative system where an exact solution exists.

4.3.3 Expectation Values (RWA Model)

We would like to use our Master equation Eq.(4.97)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i\bar{\Omega}[a^\dagger a, \rho] - \kappa \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a\rho a^\dagger \right\} \\ &\quad - 2\kappa n_B(\Omega) \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a a^\dagger - a\rho a^\dagger - a^\dagger \rho a \right\} \end{aligned}$$

and calculate some ‘useful’ quantities as, for examples, expectation values of System (= oscillator) observables $\hat{\theta}$. Let us do this for the number operator, $\hat{\theta} = \hat{n} = a^\dagger a$.

Multiplying with n and taking the trace, we obtain

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle n \rangle(t) &= -i\bar{\Omega}\text{Tr}\left(n[a^\dagger a, \rho]\right) - \kappa\text{Tr}\left\{a^\dagger aa^\dagger a\rho + \rho a^\dagger aa^\dagger a - 2a\rho a^\dagger a^\dagger a\right\} \\
&\quad - 2\kappa n_B(\Omega)\text{Tr}\left\{a^\dagger aa^\dagger a\rho + \rho aa^\dagger a^\dagger a - a^\dagger aa\rho a^\dagger - a^\dagger aa^\dagger \rho a\right\} \\
&= -i\bar{\Omega}\text{Tr}\left(a^\dagger aa^\dagger a\rho - a^\dagger a\rho a^\dagger a\right) - \kappa\text{Tr}\left\{2a^\dagger aa^\dagger a\rho - 2\rho a^\dagger (aa^\dagger - 1)a\right\} \\
&\quad - 2\kappa n_B(\Omega)\text{Tr}\left\{a^\dagger aa^\dagger a\rho + \rho(a^\dagger a + 1)a^\dagger a - a^\dagger (aa^\dagger - 1)a\rho - aa^\dagger aa^\dagger \rho\right\} \\
&= -2\kappa\text{Tr}\left\{\rho a^\dagger a\right\} \\
&\quad - 2\kappa n_B(\Omega)\text{Tr}\left\{a^\dagger aa^\dagger a\rho + \rho(a^\dagger a + 1)a^\dagger a - a^\dagger (aa^\dagger - 1)a\rho - (a^\dagger a + 1)(a^\dagger a + 1)\rho\right\} \\
&= -2\kappa\text{Tr}\left\{\rho a^\dagger a\right\} + 2\kappa n_B(\Omega) \\
&= -2\kappa(\langle n \rangle(t) - n_B(\Omega)). \tag{4.100}
\end{aligned}$$

This now is a simple first order differential equation which has the solution

$$\langle n \rangle(t) = \langle n \rangle(t=0)e^{-2\kappa t} + \kappa n_B(\Omega)(1 - e^{-2\kappa t}). \tag{4.101}$$

In particular, one has

$$\langle n \rangle(t \rightarrow \infty) = n_B(\Omega). \tag{4.102}$$

For large times, the occupation number is thus given by the thermal equilibrium Bose distribution, regardless of the initial condition $\langle n \rangle(t=0)$.

4.3.4 Master Equation (Non-RWA Model)

Let us re-call the non-RWA model

$$\begin{aligned}
H_{\text{total}} &\equiv H_S + H_{SB} + H_B \\
&= \Omega a^\dagger a + \sum_Q \gamma_Q (a_Q + a_Q^\dagger)(a + a^\dagger) + \sum_Q \omega_Q a_Q^\dagger a_Q.
\end{aligned}$$

In the following, we will have a closer look at the properties of bath correlation functions. We first re-call the definition of the bath correlation function,

$$\begin{aligned}
C(t) &\equiv \text{Tr}_B \left[\tilde{B}(t) B R_0 \right] = \text{Tr}_B \left[\sum_{QQ'} \gamma_Q \gamma_{Q'} (a_Q e^{-i\omega_Q t} + a_Q^\dagger e^{i\omega_Q t})(a_{Q'} + a_{Q'}^\dagger) R_0 \right] \\
&= \sum_Q \gamma_Q^2 \left[e^{-i\omega_Q t} (1 + n_B(\omega_Q)) + e^{i\omega_Q t} n_B(\omega_Q) \right] \\
&= \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) \left[e^{-i\omega t} (1 + n_B(\omega)) + e^{i\omega t} n_B(\omega) \right] = C^*(-t). \tag{4.103}
\end{aligned}$$

Furthermore, $n_B(\omega) \equiv 1/[e^{\beta\omega} - 1]$ is the Bose function.

To simplify things, we introduce the *bosonic spectral density* $\rho(\omega)$. All the dependence on the coupling constants γ_Q is encapsulated within the spectral density $\rho(\omega)$. The latter is often parametrised as

$$\rho(\omega) = 2\alpha\omega_c^{1-s}\omega^s e^{-\omega/\omega_c}, \quad (4.104)$$

where α is the dimensionless *coupling parameter* and ω_c is the *cutoff frequency*. Note that $\rho(\omega)$ has the dimension $[\omega]$ which is the reason for the pre-factor ω_c^{1-s} . The parameter s determines the low-frequency behaviour of $\rho(\omega)$, and one calls couplings with

$$\begin{aligned} s < 1 & : & \text{sub-ohmic} \\ s = 1 & : & \text{ohmic} \\ s > 1 & : & \text{super-ohmic.} \end{aligned} \quad (4.105)$$

This classification has its origin in the analysis of the dissipative two-level (spin-boson) system which we will discuss below.

The case $s = 1, \omega_c \rightarrow \infty$

$$\rho(\omega) = 2\alpha\omega \quad (4.106)$$

is called *scaling limit* of the ohmic bath and has the special property of homogeneity $\rho(k\omega) = k\rho(\omega)$.

4.3.5 Properties of $C(t)$, validity of Markov assumption

One can write

$$C(t) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) [\coth(\beta\omega/2) \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)], \quad (4.107)$$

where we used the useful identity

$$\coth(\beta\omega/2) = 1 + 2n_B(\omega). \quad (4.108)$$

Calculation of the integral with $\rho(\omega)$ given by Eq.(4.104) yields

$$\begin{aligned} C(t) &= 2\alpha\omega_c^{1-s}\beta^{-(s+1)} \times \\ &\Gamma(s+1) \left[\zeta\left(s+1, \frac{1+\beta\omega_c - i\omega_c t}{\beta\omega_c}\right) + \zeta\left(s+1, \frac{1+i\omega_c t}{\beta\omega_c}\right) \right], \end{aligned} \quad (4.109)$$

where Γ is the Gamma function and

$$\zeta(z, u) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+u)^z}, \quad u \neq 0, -1, -2, \dots \quad (4.110)$$

is the generalised Zeta function (cf. W. Magnus, F. Oberhettinger, and R. P. Soni, *Formulas and Theorem for the Special Functions of Mathematical Physics*, Springer, Berlin 1966). The zero temperature limit is obtained either from the $\beta \rightarrow \infty$ limit of Eq.(4.109) or directly by calculating the integral,

$$C(t) = 2\alpha\omega_c^{s+1}\Gamma(s+1)(1+i\omega_c t)^{-(s+1)}. \quad (4.111)$$

With explicit expressions like Eq. (4.109) and Eq. (4.111), one can now directly assess the validity of the Markov assumption (Assumption 2a above): ‘*the bath correlation function $C_{kl}(\tau)$ is strongly peaked around $\tau = 0$ with a peak width $\delta\tau \ll \gamma^{-1}$, where γ is a typical rate of change of $\tilde{\rho}(t')$.*’ For example, for $T = 0$, $\gamma = 2\pi\rho(\Omega)$, and within the model $\rho(\omega) = 2\alpha\omega_c^{1-s}\omega^s e^{-\omega/\omega_c}$, Eq.(4.104), one has $\delta\tau \sim \omega_c^{-1}$, cf. Eq.(4.111). This would mean

$$\begin{aligned} \omega_c^{-1}4\pi\alpha\omega_c^{1-s}\Omega^s e^{-\Omega/\omega_c} &\ll 1 \\ 4\pi\alpha(\Omega/\omega_c)^s e^{-\Omega/\omega_c} &\ll 1, \end{aligned} \quad (4.112)$$

which is fulfilled for large ω_c ($\Omega/\omega_c \lesssim 1$), $s > 0$, and small α . The condition of small α is consistent with the Born approximation (perturbation theory in the coupling to the bath).

4.3.6 Derivation of Master equation (non-RWA), secular approximation

We now move on to derive the Master equation for the non-RWA model. Using $\tilde{S}(t) = ae^{-i\Omega t} + a^\dagger e^{i\Omega t}$, we have

$$\begin{aligned} D &\equiv \int_0^\infty d\tau C(\tau)\tilde{S}(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C(\tau) \left[ae^{i\Omega\tau} + a^\dagger e^{-i\Omega\tau} \right] \\ &= \hat{C}(-i\Omega)a + \hat{C}(i\Omega)a^\dagger \equiv c_- a + c_+ a^\dagger \\ E &\equiv \int_0^\infty d\tau C^*(\tau)\tilde{S}(-\tau) = \int_0^\infty d\tau C^*(\tau)\tilde{S}^\dagger(-\tau) = D^\dagger \\ &= c_+^* a + c_-^* a^\dagger, \end{aligned} \quad (4.113)$$

where we used the Laplace transform of $C(\tau)$,

$$\hat{C}(z) \equiv \int_0^\infty d\tau e^{-z\tau} C(\tau). \quad (4.114)$$

We now note that $\hat{C}(z) = \hat{C}_{12}(z) + \hat{C}_{21}(z)$. In the secular approximation, one sets

$$\begin{aligned} \hat{C}_{12}(i\Omega) &\equiv \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) e^{-i\omega t} e^{-i\Omega t} (1 + n_B(\omega)) \rightarrow 0 \\ \hat{C}_{21}(-i\Omega) &\equiv \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) e^{i\omega t} e^{i\Omega t} n_B(\omega) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.115)$$

The real parts of $\hat{C}_{12}(i\Omega)$ and $\hat{C}_{21}(-i\Omega)$ are zero because $\delta(\omega + \Omega)$ yields no contribution from the integral (remember that $\Omega > 0$). This approximation therefore neglects the

imaginary parts of $\hat{C}_{12}(i\Omega)$ and $\hat{C}_{21}(-i\Omega)$ which, however, do not lead to damping but only to a renormalisation of the system Hamiltonian H_S . For consistency, we therefore neglect the imaginary parts of $\hat{C}_{12}(-i\Omega)$ and $\hat{C}_{21}(i\Omega)$ as well. Therefore,

$$\begin{aligned} c_- + c_+ &\approx \frac{1}{2}(\gamma_+ + \gamma) = \pi\rho(\Omega)[1 + 2n_B(\omega)] \\ c_- - c_+ &\approx \frac{1}{2}(\gamma_+ - \gamma) = \pi\rho(\Omega). \end{aligned} \quad (4.116)$$

Finally, we introduce a phase-space (x - p) representation: let us write

$$D = \frac{1}{\sqrt{2}}((c_- + c_+)x + i(c_- - c_+)p) \approx \frac{\pi\rho(\Omega)}{\sqrt{2}} \left(x \coth\left(\frac{\beta\Omega}{2}\right) + ip \right), \quad (4.117)$$

where we again used $\coth(\beta\Omega/2) = 1 + 2n_B(\Omega)$. Using $E = D^\dagger$, one obtains the *Master equation from the Non-RWA Model in secular approximation*,

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H_S, \rho] - \frac{\pi\rho(\Omega)}{2} \coth\left(\frac{\beta\Omega}{2}\right) (x^2\rho + \rho x^2 - 2x\rho x) \quad (4.118)$$

$$- i\frac{\pi\rho(\Omega)}{2} (xp\rho - \rho px - p\rho x + x\rho p). \quad (4.119)$$

4.4 Phase Space Solution Methods

We discuss these methods here only for the Master equation of the damped harmonic oscillator in RWA,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i\bar{\Omega}[a^\dagger a, \rho] - \kappa \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a\rho a^\dagger \right\} \\ &\quad - 2\kappa n_B(\Omega) \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a a^\dagger - a\rho a^\dagger - a^\dagger \rho a \right\}. \end{aligned} \quad (4.120)$$

4.4.1 P -representation

The idea here is to convert the operator equation into a partial differential equation (PDE) for the P -representation of the reduced density operator ρ . The definition of the P -representation of an operator $\hat{\theta}$ is (WALLS/MILBURN, CARMICHAEL)

$$\hat{\theta} = \int \frac{d^2z}{\pi} P(\hat{\theta}; z) |z\rangle\langle z|. \quad (4.121)$$

Remarks:

1. Other authors use a definition without the $1/\pi$.
2. Some books write $P(z)$ (instead of $P(\hat{\theta} = \rho; z)$) for the P -representation of the density operator, and use the form

$$P(z) \equiv P(z, z^*) = \text{Tr} \left[\rho \delta(z^* - a^\dagger) \delta(z - a) \right]. \quad (4.122)$$

(again multiply this by π to get our P).

3. For coherent states $\rho = |z_0\rangle\langle z_0|$, one has $P(z) = \pi\delta(z - z_0)$.

4. We have the *Metha-formula*,

$$P(\hat{\theta}; z) = e^{|z|^2} \int \frac{d^2z'}{\pi} \langle -z' | \hat{\theta} | z' \rangle e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^*z'}. \quad (4.123)$$

5. The P -distribution can be highly singular. Example: number state.

In order to transform the master equation, we require the P -representation of terms like $a\rho a^\dagger$ etc. Let us start with $a^\dagger\rho$.

Method 1: We follow Walls/Milburn and introduce *Bargmann states*

$$||z\rangle \equiv e^{|z|^2/2}|z\rangle \equiv \sum_n \frac{z^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle, \quad (4.124)$$

(‘coherent states without the normalisation factor in front’). Therefore,

$$a^\dagger||z\rangle = \frac{\partial}{\partial z}||z\rangle, \quad \langle z||a = \frac{\partial}{\partial z^*}\langle z|. \quad (4.125)$$

We use this to write

$$\begin{aligned} \rho &= \int \frac{d^2z}{\pi} ||z\rangle\langle z| e^{-|z|^2} \underline{P(z)} \rightsquigarrow \\ a^\dagger\rho &= \int \frac{d^2z}{\pi} a^\dagger||z\rangle\langle z| e^{-|z|^2} P(z) = \int \frac{d^2z}{\pi} \left[\frac{\partial}{\partial z} ||z\rangle \right] \langle z| e^{-|z|^2} P(z) \\ &= - \int \frac{d^2z}{\pi} ||z\rangle\langle z| \frac{\partial}{\partial z} e^{-zz^*} P(z) = \int \frac{d^2z}{\pi} ||z\rangle\langle z| e^{-|z|^2} \underline{\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right)} P(z), \end{aligned} \quad (4.126)$$

using integration by parts, $\frac{\partial}{\partial z}\langle z| = 0$, and assuming the vanishing of $P(z)$ at infinity. Comparison yields

$$a^\dagger\rho \leftrightarrow \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) P(z). \quad (4.127)$$

Method 2: Use the Metha formula for $\hat{\theta} = a^\dagger\rho$,

$$\begin{aligned} P(a^\dagger\rho; z) &= e^{|z|^2} \int \frac{d^2z'}{\pi} \langle -z' | a^\dagger\rho | z' \rangle e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^*z'} \\ &= e^{zz^*} \int \frac{d^2z'}{\pi} (-z'^*) \langle -z' | \rho | z' \rangle e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^*z'} = \\ &= \left[-\frac{\partial}{\partial z} + z^* \right] (e^{zz^*}) \int \frac{d^2z'}{\pi} \langle -z' | \rho | z' \rangle e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^*z'}. \end{aligned} \quad (4.128)$$

Here, we generate $-z'^*$ in the integral by differentiation with respect to the parameter z and subsequent compensation of the term arising from e^{zz^*} , thus arriving even faster at

Eq.(4.127). Similarly,

$$\begin{aligned} P(\rho a; z) &= e^{zz^*} \int \frac{d^2 z'}{\pi} \langle -z' | \rho | z' \rangle z' e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^* z'} = \\ &= \left[-\frac{\partial}{\partial z^*} + z \right] (e^{zz^*}) \int \frac{d^2 z'}{\pi} \langle -z' | \rho | z' \rangle e^{|z'|^2} e^{zz'^* - z^* z'}. \end{aligned} \quad (4.129)$$

For the terms $a^\dagger a \rho$, the first method is easier:

$$\begin{aligned} a^\dagger a \rho &= \int \frac{d^2 z}{\pi} a^\dagger a ||z\rangle \langle z| e^{-|z|^2} P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} \left[\frac{\partial}{\partial z} ||z\rangle \right] \langle z| e^{-|z|^2} z P(z) \\ &= - \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| \frac{\partial}{\partial z} e^{-zz^*} z P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| e^{-|z|^2} \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) z P(z) \\ \rho a^\dagger a &= \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| a^\dagger a e^{-|z|^2} P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \left[\frac{\partial}{\partial z^*} \langle z| \right] e^{-|z|^2} z^* P(z) \\ &= - \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| \frac{\partial}{\partial z^*} e^{-zz^*} z^* P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| e^{-|z|^2} \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) z^* P(z) \\ a \rho a^\dagger &= \int \frac{d^2 z}{\pi} a ||z\rangle \langle z| a^\dagger e^{-|z|^2} P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| e^{-|z|^2} z z^* P(z) \\ a^\dagger \rho a &= \int \frac{d^2 z}{\pi} \left[\frac{\partial}{\partial z} ||z\rangle \right] \left[\frac{\partial}{\partial z^*} \langle z| \right] e^{-|z|^2} P(z) = \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| \frac{\partial}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial z} e^{-|z|^2} P(z) \\ &= \int \frac{d^2 z}{\pi} ||z\rangle \langle z| e^{-|z|^2} \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) P(z). \end{aligned}$$

In particular, for the master equation we need

$$\begin{aligned} \left\{ a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a \rho a^\dagger \right\} &\leftrightarrow \left\{ \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) z + \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) z^* - 2z z^* \right\} P(z) \\ &= - \left\{ \frac{\partial}{\partial z} z + \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \right\} P(z) = - \left\{ z \frac{\partial}{\partial z} + z^* \frac{\partial}{\partial z^*} + 2 \right\} P(z) \\ \left\{ a^\dagger a \rho + \rho (a^\dagger a + 1) - a \rho a^\dagger - a^\dagger \rho a \right\} &\leftrightarrow \left\{ \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) z + \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) z^* + 1 \right. \\ &\quad \left. - z z^* - \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} P(z) \\ = \left\{ -\frac{\partial}{\partial z} z + z \frac{\partial}{\partial z} + 1 + \frac{\partial}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial z} \right\} P(z) &= \frac{\partial}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial z} P(z) \\ \left[a^\dagger a, \rho \right] &\leftrightarrow \left[-\frac{\partial}{\partial z} z + \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \right] P(z) = \left[-z \frac{\partial}{\partial z} + z^* \frac{\partial}{\partial z^*} \right] P(z). \end{aligned}$$

The whole master equation is therefore transformed into

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(z, t) = \left\{ 2\kappa + i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \frac{\partial}{\partial z} - i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \frac{\partial}{\partial z^*} + 2\kappa n_B \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right\} P(z, t)} \quad (4.130)$$

Here, we have explicitly indicated that the P -function depends both on z and on the time t .

Remarks:

- The first order derivate terms are called drift terms, the second order derivate terms diffusion term.
- This is not directly solvable by Fourier transformation: z, z^* -dependence of coefficients.
- Written in real coordinates, this has the form of a *Fokker-Planck equation*

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}) = \left(- \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} A_j(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(\mathbf{x}) \right) P(\mathbf{x}) \quad (4.131)$$

4.4.2 Zero temperature

In this case, we only have first order derivatives. There is a (more or less) complete theory of first order PDEs: they are solved by the method of characteristics (cf. Courant/Hilbert).

We write the PDE as

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} - i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \frac{\partial}{\partial z} + i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \frac{\partial}{\partial z^*} \right\} P(z, z^*, t) = 2\kappa P(z, z^*, t) \quad (4.132)$$

and consider the function $P(z, z^*, t)$ on *trajectories* $z = z(t)$ and $z^* = z^*(t)$ where $P(z, z^*, t) = P(z(t), z^*(t), t)$. We regard the l.h.s. of Eq.(4.132) as a total differential. Along the trajectories, the temporal change of P is

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(z(t), z^*(t), t) &= \{ \dot{z}(t) \partial_z + \dot{z}^*(t) \partial_{z^*} + \partial_t \} P(z(t), z^*(t), t) \\ &= 2\kappa P(z(t), z^*(t), t) \end{aligned} \quad (4.133)$$

Comparison yields

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= -i [\bar{\Omega} - i\kappa] z(t) \rightsquigarrow z(t) = z_0 e^{-i[\bar{\Omega} - i\kappa]t} \\ \dot{z}^*(t) &= i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^*(t) \rightsquigarrow z^*(t) = z_0^* e^{i[\bar{\Omega} + i\kappa]t}. \end{aligned} \quad (4.134)$$

On the other hand, $\frac{d}{dt} P = 2\kappa P$ yields

$$P(z(t), z^*(t), t) = e^{2\kappa t} P_0(z_0, z_0^*). \quad (4.135)$$

Here, P_0 is the initial condition for P , with $z_0 = z(t=0)$ and $z_0^* = z^*(t=0)$. This looks very innocent but has a deep physical (and geometrical) meaning: we can trace back our trajectories $z(t), z^*(t)$ to their origin z_0, z_0^* , writing

$$z_0 = z(t) e^{+i[\bar{\Omega} - i\kappa]t}, \quad z_0^* = z^*(t) e^{-i[\bar{\Omega} + i\kappa]t}. \quad (4.136)$$

We thus have expressed the initial values z_0, z_0^* in terms of the ‘final’ values $z(t), z^*(t)$. Insertion into Eq.(4.135) yields

$$P(z(t), z^*(t), t) = e^{2\kappa t} P_0 \left(z(t) e^{+i[\bar{\Omega}-i\kappa]t}, z^*(t) e^{-i[\bar{\Omega}+i\kappa]t} \right). \quad (4.137)$$

We now write again z and z^* instead of $z(t), z^*(t)$, and therefore have

$$P(z, z^*, t) = e^{2\kappa t} P_0 \left(z e^{+i[\bar{\Omega}-i\kappa]t}, z^* e^{-i[\bar{\Omega}+i\kappa]t} \right). \quad (4.138)$$

4.4.3 Finite temperatures

Since we know the solution for $n_B = 0$, we perform a transformation of variables and seek the solution for $n_B > 0$ in the form

$$P(z, z^*, t) = F(u, u^*, s), \quad u = z e^{+i[\bar{\Omega}-i\kappa]t}, u^* = z^* e^{-i[\bar{\Omega}+i\kappa]t}, s = t, \quad (4.139)$$

which leads to

$$\begin{aligned} \partial_t P &= \left(i [\bar{\Omega} - i\kappa] z e^{+i[\bar{\Omega}-i\kappa]t} \partial_u + -i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* e^{-i[\bar{\Omega}+i\kappa]t} \partial_{u^*} + \partial_s \right) F(u, u^*, s) \\ &= \left(i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \partial_z - i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \partial_{z^*} \right) P(z, z^*, t) + \partial_s F(u, u^*, s) \\ &\doteq \left(i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \partial_z - i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \partial_{z^*} + 2\kappa + 2\kappa n_B \partial_z \partial_{z^*} \right) P(z, z^*, t), \end{aligned} \quad (4.140)$$

where in the last line we compared with the original PDE. Therefore, one has

$$\begin{aligned} \partial_s F(u, u^*, s) &= 2\kappa F(u, u^*, s) + 2\kappa n_B \partial_z \partial_{z^*} P(z, z^*, t) \\ &= 2\kappa F(u, u^*, s) + 2\kappa n_B e^{2\kappa s} \partial_u \partial_{u^*} F(u, u^*, s), \end{aligned} \quad (4.141)$$

where we used $\partial_z \partial_{z^*} = e^{2\kappa s} \partial_u \partial_{u^*}$, cf. Eq.(4.139). The big advantage now is that we had got rid of the first order derivatives with the z, z^* -dependent coefficients. Eq.(4.141) is now a standard diffusion equation with time ($s = t$)-dependent coefficients, which can be solved by Fourier transformation:

Reminder: Complex Fourier Transformation, cf (4.141)

$$\begin{aligned} \text{Fourier Trafo } \tilde{f}(w) &\equiv \int d^2 z e^{i\mathbf{z}\mathbf{w}} f(z), \quad f(z) = \int \frac{d^2 w}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{z}\mathbf{w}} \tilde{f}(w) \\ \text{scalar product } \mathbf{z}\mathbf{w} &\equiv \frac{1}{2} (z w^* + z^* w) = (z_1, z_2) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.142)$$

Reminder: Gauß Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad \Re a > 0 \quad (4.143)$$

$$\int \frac{d^2 w}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{z}\mathbf{w}} e^{-\frac{a}{4}\mathbf{w}\mathbf{w}} = \frac{1}{\pi a} e^{-\frac{|z|^2}{a}}. \quad (4.144)$$

We now Fourier-transform Eq.(4.141), $\partial_s F = (2\kappa + 2\kappa n_B e^{2\kappa s} \partial_u \partial_{u^*}) F$, to obtain

$$\begin{aligned}
\partial_s \tilde{F}(w, w^*, s) &= \left(2\kappa + 2\kappa n_B e^{2\kappa s} \left(-\frac{1}{4} \mathbf{w} \mathbf{w} \right) \right) \tilde{F}(w, w^*, s) \quad (4.145) \\
\rightsquigarrow \tilde{F}(w, w^*, s) &= \exp \left\{ 2\kappa s - \frac{1}{4} n_B (e^{2\kappa s} - 1) \mathbf{w} \mathbf{w} \right\} \tilde{F}(w, w^*, s = 0) \\
\rightsquigarrow F(u, u^*, s) &= \int \frac{d^2 w}{(2\pi)^2} e^{-i \mathbf{u} \mathbf{w}} \exp \left\{ 2\kappa s - \frac{1}{4} n_B (e^{2\kappa s} - 1) \mathbf{w} \mathbf{w} \right\} \tilde{F}(w, w^*, s = 0) \\
&= \int d^2 u' \int \frac{d^2 w}{(2\pi)^2} e^{-i(\mathbf{u} - \mathbf{u}') \mathbf{w}} e^{\{ 2\kappa s - \frac{1}{4} n_B (e^{2\kappa s} - 1) \mathbf{w} \mathbf{w} \}} F(u', u'^*, s = 0) \\
&= \frac{e^{2\kappa s}}{\pi n_B (e^{2\kappa s} - 1)} \int d^2 u' \exp \left\{ -\frac{|u - u'|^2}{n_B (e^{2\kappa s} - 1)} \right\} F(u', u'^*, s = 0)
\end{aligned}$$

Now we remember $u = z e^{+i[\bar{\Omega} - i\kappa]t}$, $s = t$, and write $u' = z'$ in $F(u', u'^*, s = 0) = P(z', z'^*, t = 0)$, to find

$$\begin{aligned}
P(z, z^*, t) &= \int d^2 z' \frac{1}{\pi n_B (1 - e^{2\kappa t})} \exp \left\{ -\frac{|z e^{+i[\bar{\Omega} - i\kappa]t} - z'|^2}{n_B (e^{2\kappa t} - 1)} \right\} P(z', z'^*, t = 0) \\
&= \int d^2 z' \frac{1}{\pi n_B (1 - e^{-2\kappa t})} \exp \left\{ -\frac{|z - z' e^{-i[\bar{\Omega} - i\kappa]t}|^2}{n_B (1 - e^{-2\kappa t})} \right\} P(z', z'^*, t = 0) \\
&\equiv \int d^2 z' G(z, z'; t) P(z', z'^*, t = 0), \\
G(z, z'; t) &\equiv \frac{1}{\pi n_B (1 - e^{-2\kappa t})} \exp \left\{ -\frac{|z - z' e^{-i[\bar{\Omega} - i\kappa]t}|^2}{n_B (1 - e^{-2\kappa t})} \right\}. \quad (4.146)
\end{aligned}$$

This is the solution of the *initial value problem* of the PDE: we have explicitly constructed the *propagator* $G(z, z'; t)$ and expressed the solution of the PDE at times $t > 0$ in terms of the *initial* P -distribution $P(z', z'^*, t = 0)$.

4.4.4 W -representation

An alternative phase-space method is to convert the operator master equation into a PDE for the Wigner function $W(A; z)$ of an operator A . The formula for the Wigner function of an *operator product* AB is

$$W(AB; z) = W(A; z) \exp \left[\frac{1}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_z \overrightarrow{\partial}_{z^*} - \overleftarrow{\partial}_{z^*} \overrightarrow{\partial}_z \right) \right] W(B; z) \quad (4.147)$$

We obtain

$$\begin{aligned}
W(a) &= z, & W(a^\dagger) &= z^* \\
W(a^\dagger a) &= z^* \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) z = z^* z - \frac{1}{2} \\
W(a^\dagger a \rho) &= \left(z^* z - \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) + \frac{1}{8} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) W(\rho) \\
&= \left(z^* z - \frac{1}{2} \right) W(\rho) + \frac{1}{2} z^* \partial_{z^*} W(\rho) - \frac{1}{2} z \partial_z W(\rho) - \frac{2}{8} \partial_z \partial_{z^*} W(\rho) \\
W(\rho a^\dagger a) &= W(\rho) \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) + \frac{1}{8} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) \left(z^* z - \frac{1}{2} \right) \\
&= \left(z^* z - \frac{1}{2} \right) W(\rho) - \frac{1}{2} z^* \partial_{z^*} W(\rho) + \frac{1}{2} z \partial_z W(\rho) - \frac{2}{8} \partial_z \partial_{z^*} W(\rho) \tag{4.148}
\end{aligned}$$

Similarly,

$$\begin{aligned}
W(a \rho) &= z \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) W(\rho) = z W(\rho) + \frac{1}{2} \partial_{z^*} W(\rho) \\
W(a \rho a^\dagger) &= \left(z W(\rho) + \frac{1}{2} \partial_{z^*} W(\rho) \right) \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) z^* \\
&= \left(z z^* W(\rho) + \frac{1}{2} z^* \partial_{z^*} W(\rho) \right) + \frac{1}{2} \partial_z (z W(\rho)) + \frac{1}{4} \partial_z \partial_{z^*} W(\rho) \\
W(a^\dagger \rho) &= z^* \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) W(\rho) = z^* W(\rho) - \frac{1}{2} \partial_z W(\rho) \\
W(a^\dagger \rho a) &= \left(z^* W(\rho) - \frac{1}{2} \partial_z W(\rho) \right) \left(1 + \frac{1}{2} (\partial_z \partial_{z^*} - \partial_{z^*} \partial_z) \right) z \\
&= \left(z z^* W(\rho) - \frac{1}{2} z \partial_z W(\rho) \right) - \frac{1}{2} \partial_{z^*} (z^* W(\rho)) + \frac{1}{4} \partial_z \partial_{z^*} W(\rho) \tag{4.149}
\end{aligned}$$

Thus,

$$\begin{aligned}
\{a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a \rho a^\dagger\} &\leftrightarrow -\{2 + z \partial_z + z^* \partial_{z^*} + \partial_z \partial_{z^*}\} W(\rho) \\
\{a^\dagger a \rho + \rho (a^\dagger a + 1) - a \rho a^\dagger - a^\dagger \rho a\} &\leftrightarrow -\partial_z \partial_{z^*} W(\rho) \\
[a^\dagger a, \rho] &\leftrightarrow (z^* \partial_{z^*} - z \partial_z) W(\rho). \tag{4.150}
\end{aligned}$$

Therefore, the master equation Eq.(4.120) is converted into

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(z, t) &= -i\bar{\Omega} (z^* \partial_{z^*} - z \partial_z) W(z, t) + \kappa \left\{ 2 + z \partial_z + z^* \partial_{z^*} + \partial_z \partial_{z^*} \right\} W(z, t) \\ &\quad + 2\kappa n_B(\Omega) \partial_z \partial_{z^*} W(z, t) \\ &= \left\{ 2\kappa + i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \frac{\partial}{\partial z} - i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \frac{\partial}{\partial z^*} + \kappa [1 + 2n_B] \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right\} W(z, t). \end{aligned} \quad (4.151)$$

We compare this with the PDE for the P -function, Eq.(4.130):

$$\frac{\partial}{\partial t} P(z, t) = \left\{ 2\kappa + i [\bar{\Omega} - i\kappa] z \frac{\partial}{\partial z} - i [\bar{\Omega} + i\kappa] z^* \frac{\partial}{\partial z^*} + 2\kappa n_B \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right\} P(z, t)$$

The difference is just in the diffusion term, i.e., $1 + 2n_B$ in the Wigner representation instead of $2n_B$ in the P representation. In the Wigner representation, even at zero temperature $T = 0$ ($n_B = 0$) one has a diffusion term in the PDE. Technically, the solution proceeds as before: one first solves the first order part via characteristics and then the diffusive part via Fourier transformation.

- A similar derivation can be done for the Q -representation, cf. Walls/Milburn. The Q -representation is more convenient for systems where the initial oscillator state is squeezed, or the decay is into a bath not in thermal equilibrium but in a squeezed state.

4.4.5 Remarks

Phase space methods are powerful tools for solving Master equations. The resulting PDEs, however, are often non-trivial and cannot be solved exactly. This is particularly true if more than one degree of freedom is involved and one has to solve *systems of PDEs*.

Systems of partial differential equations are really complicated beasts: in contrast to systems of ordinary differential equations, they are not equivalent to a single PDE of higher order, cf. the discussion in Courant/Hilbert ‘Methoden der Mathematischen Physik’.

Related problems occur in the theory of the Laser, where one has to deal with PDEs containing derivatives up to infinite order. This is discussed in the book by Scully/Lamb. Another, very recent challenge are systems of Master equations with non-linear couplings between bosonic and electronic degrees of freedom in *nano-electromechanical systems*.

4.5 Grobkörnungs-Verfahren

Markov- und Sekularnäherung können beide gleichzeitig aus einem Grobkörnungs-Verfahren hergeleitet werden, das wir im Folgenden beschreiben wollen ². Hierzu setzen wir unsere

² vgl. G. Schaller, T. Brandes ‘*Preservation of Positivity by Dynamical Coarse-Graining*’, Phys. Rev. A **78**, 022106 (2008), und SKRIPT SCHALLER

Dichtematrix im Wechselwirkungsbild als Exponentialfunktion in Superoperator-Form an;

$$\tilde{\rho}(t) = e^{\mathcal{L}_{\text{eff}} t} \rho(0), \quad (4.152)$$

wobei der effektive *Liouvillian* (Zeitentwicklungsoperator für Dichtematrizen) zu bestimmen ist. Wir bestimmen ihn aus der Forderung, dass er zumindest für kleine Zeiten τ mit der exakten Zeitentwicklung von $\tilde{\rho}(\tau)$, übereinstimmen sollten. Letztere erhalten wir aus Gl. (4.35) in zweiter Ordnung Störungstheorie durch Integration von Gl. (4.35) mit $\tilde{\rho}(t') \rightarrow \rho(0)$ auf der rechten Seite. Wir starten also mit einer faktorisierenden Anfangsbedingung zwischen System und Bad und werten einfach die Zeitentwicklung bis zur zweiten Ordnung ohne weitere Annahmen aus;

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\tau) &= \rho(0) - \int_0^\tau dt \int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{kl}(t, t') \tilde{S}_k(t) \tilde{S}_l(t') \tilde{\rho}(0) + C_{kl}(t', t) \tilde{\rho}(0) \tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(t) \right) \\ &+ \int_0^\tau dt \int_0^t dt' \sum_{kl} \left(C_{lk}(t, t') \tilde{S}_k(t') \tilde{\rho}(0) \tilde{S}_l(t) + C_{lk}(t', t) \tilde{S}_k(t) \tilde{\rho}(0) \tilde{S}_l(t') \right). \end{aligned} \quad (4.153)$$

Der Vergleich mit dem Ansatz Gl. (4.152) ergibt dann durch Entwickeln von $e^{\mathcal{L}_{\text{eff}} \tau} = 1 + \tau \mathcal{L}_{\text{eff}} + \dots$ eine Differenzen-Approximation ('Grobkörnung') der zeitlichen Ableitung;

$$\frac{\tilde{\rho}(\tau) - \tilde{\rho}(0)}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \dot{\tilde{\rho}}(t) = \mathcal{L}_{\text{eff}} \tilde{\rho}(0) \quad (4.154)$$

mit dem effektiven Liouvillian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{eff}} \rho &= -\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} ds \sum_{kl} \left(C_{kl}(t', s) \tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(s) \rho + C_{kl}(s, t') \rho \tilde{S}_k(s) \tilde{S}_l(t') \right) \\ &+ \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} ds \sum_{kl} \left(C_{lk}(t', s) \tilde{S}_k(s) \rho \tilde{S}_l(t') + C_{lk}(s, t') \tilde{S}_k(t') \rho \tilde{S}_l(s) \right) \end{aligned} \quad (4.155)$$

als Superoperator-Gleichung bei Anwendung auf Dichteoperatoren (Zustände) ρ , wobei wir die Integrationsvariablen in t' und s umbenannt haben, um nicht mit den Zeiten t und τ durcheinander zu kommen. Hierbei wird τ als *Grobkörnungs-Parameter* aufgefasst, d.h. die Zeit τ ist hier eine feste Konstante. Mit Gl. (4.155) ist die Anwendung von \mathcal{L}_{eff} auf beliebige ρ festgelegt und bestimmt dann nicht nur wie in Gl. (4.154) die Kurzzeitentwicklung, sondern nach dem Ansatz Gl. (4.152) die Bewegungsgleichung für *alle* Zeiten $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) &= \mathcal{L}_{\text{eff}} \tilde{\rho}(t) \quad (4.156) \\ &= -\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} ds \sum_{kl} \left(C_{kl}(t', s) \tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(s) \tilde{\rho}(t) + C_{kl}(s, t') \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_k(s) \tilde{S}_l(t') \right) \\ &+ \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} ds \sum_{kl} \left(C_{lk}(t', s) \tilde{S}_k(s) \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') + C_{lk}(s, t') \tilde{S}_k(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(s) \right). \end{aligned}$$

Wir erhalten also eine *Markovsche* Bewegungsgleichung, da die Dichtematrix auf der rechten Seite von t und nicht von den Zeitintegrationsvariablen t', s abhängt.

4.5.1 Positivität und Lindblad-Form

Wir können Gl. (4.156) durch Einführen von Stufenfunktionen $\theta(t' - s)$ umschreiben. Die letzte Zeile wird dann durch Vertauschen von t' mit s im letzten Term einfach zu

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau ds \sum_{kl} C_{lk}(t', s) \tilde{S}_k(s) \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t'),$$

während die erste Zeile etwas komplizierter mit $\theta(t' - s) = \frac{1}{2}(1 + \text{sgn}(t' - s))$ zu

$$-\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau ds \sum_{kl} C_{kl}(t', s) \left(\frac{1}{2} \{ \tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(s), \tilde{\rho}(t) \} + \frac{1}{2} \text{sgn}(t' - s) [\tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(s), \tilde{\rho}(t)] \right)$$

wird, insgesamt also

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) &= -\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau ds \sum_{kl} C_{kl}(t', s) \frac{1}{2} \text{sgn}(t' - s) [\tilde{S}_k(t') \tilde{S}_l(s), \tilde{\rho}(t)] \\ &+ \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau ds \sum_{kl} C_{lk}(t', s) \left(\tilde{S}_k(s) \tilde{\rho}(t) \tilde{S}_l(t') - \frac{1}{2} \{ \tilde{S}_l(t') \tilde{S}_k(s), \tilde{\rho}(t) \} \right). \end{aligned} \quad (4.157)$$

Es muss jetzt gezeigt werden, dass sich diese Form auf Lindblad-Form transformieren lässt und damit per Konstruktion für alle τ die Positivität der Dichtematrix $\rho(t)$ erhält. Wir nehmen der Einfachheit halber hier hermitesche System- und Bad-Operatoren S und B und schreiben die zweite Zeile als Superoperator in Multi-Index-Form;

$$\mathcal{D}\rho \equiv \frac{1}{\tau} \sum_{\kappa\lambda} a_{\lambda\kappa} \left(s_{\kappa} \rho s_{\lambda} - \frac{1}{2} \{ s_{\lambda} s_{\kappa}, \rho \} \right), \quad a_{\lambda\kappa} = \text{Tr}_B \rho_B \tilde{B}_l(t') \tilde{B}_k(s), \quad (4.158)$$

vgl. Gl. (4.32). Es entspricht also $\kappa = (k, s)$, $\lambda = (l, t')$, $\sum_{\kappa} = \sum_k \int_0^\tau ds$. Hierbei wird das Integral einfach als zusätzliche Summation aufgefasst. Die Matrix $a_{\lambda\kappa}$ ist nun positiv-definit, denn

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa\lambda} z_{\lambda}^* a_{\lambda\kappa} z_{\kappa} &= \text{Tr}_B \rho_B \left(\sum_l z_l(t') \int_0^\tau dt' \tilde{B}_l(t') \right)^\dagger \left(\sum_k z_k(s) \int_0^\tau ds \tilde{B}_k(s) \right) \\ &\equiv \text{Tr}_B \rho_B B_z^\dagger B_z \geq 0. \end{aligned} \quad (4.159)$$

4.5.2 Auswertung

Die technische Aufgabe ist jetzt die Umformung dieser Bewegungsgleichung in eine handhabbare Form. Dazu werten wir durch Einschieben von vollständigen Einsen $\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$

von Systemhamiltonian- Eigenzuständen den effektiven Liouvillian aus. Wir definieren hierzu

$$S_k^{\alpha\beta} = \langle \alpha | S_k | \beta \rangle, \quad P_{\alpha\beta} \equiv |\alpha\rangle\langle\beta|, \quad C_{kl}(t' - s) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t'-s)} \tilde{C}_{kl}(\omega), \quad (4.160)$$

wobei wir das Bad im Gleichgewicht annehmen (deshalb hängen die Korrelationsfunktionen nur von der Zeitdifferenz ab). Die auftretenden Zeitintegrale aus der Ausführung des Wechselwirkungsbildes haben dann die Form

$$\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_1, \omega_2) \equiv \int_0^\tau dt' \int_0^{t'} ds e^{-i\omega(t'-s)} e^{i\omega_1 t' - i\omega_2 s}. \quad (4.161)$$

Alles eingesetzt ergibt dann die etwas längliche Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = & \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{\tau} [\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}) + \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\alpha\delta}, \omega_{\beta\gamma})] \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_k^{\alpha\delta} S_l^{\gamma\beta} \right) P_{\alpha\delta} \tilde{\rho}(t) P_{\gamma\beta} \\ & - \sum_{\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{\tau} \mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right) P_{\gamma\delta} \tilde{\rho}(t) \\ & - \sum_{\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{2\tau} \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma}) \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right) \tilde{\rho}(t) P_{\gamma\delta}. \end{aligned} \quad (4.162)$$

Wir können das geschickt umschreiben, indem wir in der zweiten Zeile

$$\frac{1}{2} \mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) + \frac{1}{2} \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma}) + \left(\frac{1}{2} \mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) - \frac{1}{2} \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma}) \right)$$

schreiben (entsprechend in der dritten Zeile). Dann kann man zusammenfassen als

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = & \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left(\int d\omega \frac{1}{\tau} [\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}) + \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\alpha\delta}, \omega_{\beta\gamma})] \sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_k^{\alpha\delta} S_l^{\gamma\beta} \right) \times \\ & \times \left(P_{\alpha\delta} \tilde{\rho}(t) P_{\gamma\beta} - \frac{1}{2} \{ P_{\alpha\delta} \tilde{\rho}(t), P_{\gamma\beta} \} \right) \\ & - \sum_{\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{2\tau} [\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) - \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma})] \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right) P_{\gamma\delta} \tilde{\rho}(t) \\ & - \sum_{\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{2\tau} [\mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma}) - \mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta})] \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right) \tilde{\rho}(t) P_{\gamma\delta}, \end{aligned} \quad (4.163)$$

wobei wir im Anti-Kommutator die Orthogonalität der Zustände ausgenutzt haben, d.h.

$$P_{\gamma\beta} P_{\alpha\delta} = \delta_{\alpha\beta} P_{\gamma\delta}. \quad (4.164)$$

Kompakt können wir das wie folgt schreiben;

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \gamma_{\alpha\delta\gamma\beta}^{\tau} \left(P_{\alpha\delta} \tilde{\rho}(t) P_{\gamma\beta} - \frac{1}{2} \{P_{\alpha\delta} \tilde{\rho}(t), P_{\gamma\beta}\} \right) - i [\mathcal{H}^{\tau}, \tilde{\rho}(t)], \quad (4.165)$$

wobei wir Tensoren für die entsprechenden Vorfaktoren einführen;

$$\gamma_{\alpha\delta\gamma\beta}^{\tau} \equiv \int d\omega \frac{1}{\tau} [\mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}) + \mathcal{F}_{\tau}(-\omega, \omega_{\alpha\delta}, \omega_{\beta\gamma})] \sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_k^{\alpha\delta} S_l^{\gamma\beta} \quad (4.166)$$

$$\mathcal{H}^{\tau} \equiv -i \sum_{\beta\gamma\delta} \int d\omega \frac{1}{2\tau} [\mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) - \mathcal{F}_{\tau}(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma})] \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right).$$

4.5.3 Born-Markov-Sekulärnäherung ($\tau \rightarrow \infty$)

Wir machen für den Langzeitlimes $\tau \rightarrow \infty$ eine Fallunterscheidung im Integral

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_1, \omega_2) &\equiv \int_0^{\tau} dt' \int_0^{t'} ds e^{-i\omega(t'-s)} e^{i\omega_1 t' - i\omega_2 s} \\ &= \frac{1 - e^{-i\tau(\omega - \omega_1)}}{(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)} + \frac{-1 + e^{i\tau(\omega_1 - \omega_2)}}{(\omega_1 - \omega_2)(\omega_2 - \omega)}, \quad \omega_j \neq \omega, \quad \omega_1 \neq \omega_2 \\ \mathcal{F}_{\tau}(\omega_1, \omega_1, \omega_2) &= \frac{1 - e^{i\tau(\omega_1 - \omega_2)} + i\tau(\omega_1 - \omega_2)}{(\omega_1 - \omega_2)^2}, \quad \omega_1 \neq \omega_2 \end{aligned} \quad (4.167)$$

$$\mathcal{F}_{\tau}(\omega_2, \omega_1, \omega_2) = \frac{-1 + e^{i\tau(\omega_1 - \omega_2)}(1 - i\tau(\omega_1 - \omega_2))}{(\omega_1 - \omega_2)^2}, \quad \omega_1 \neq \omega_2. \quad (4.168)$$

Für $\tau \rightarrow \infty$ wird $\frac{1}{\tau} \mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_1, \omega_2)$ also im Fall $\omega_1 \neq \omega_2$ immer Null bzw. bleibt (bei $\omega = \omega_1$ oder $\omega = \omega_2$) endlich, was aber in der anschliessenden Integration über ω nur isolierte Punkte (Menge vom Mass Null) sind, die nichts beitragen.

Anders ist das für $\omega_1 = \omega_2$, wo für $\omega \rightarrow \omega_1$ das Integral divergiert. In der Tat ist $\mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_1, \omega_1)$ dann eine *Distribution*, die folgendermassen berechnet werden kann: Im Laplace-Raum ist

$$\hat{\mathcal{F}}_z(\omega, \omega_1, \omega_1) \equiv \int_0^{\infty} d\tau e^{-z\tau} \int_0^{\tau} dt' \int_0^{t'} ds e^{-i(\omega - \omega_1)(t'-s)}, \quad \Re z > 0 \quad (4.169)$$

gegeben, was ein integriertes Faltungintegral ist. Nach dem Faltungssatz ist also

$$\hat{\mathcal{F}}_z(\omega, \omega_1, \omega_1) = \frac{1}{z} \frac{1}{z + i(\omega - \omega_1)} \quad (4.170)$$

Jetzt benutzen wir, dass ein Verhalten $\propto t$ für $t \rightarrow \infty$ im Laplaceraum einem Verhalten $\propto \frac{1}{z^2}$ für $z \rightarrow 0$ entspricht. Der Vorfaktor ist gerade das, was wir benötigen, d.h.

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \mathcal{F}_{\tau}(\omega, \omega_1, \omega_1) &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z^2 \hat{\mathcal{F}}_z(\omega, \omega_1, \omega_1) \\ &= \frac{-i}{\omega - \omega_1 - iO^+} = -i\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_1} + \pi\delta(\omega - \omega_1) \end{aligned} \quad (4.171)$$

Damit wird

$$\begin{aligned}
& \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} [\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}) + \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\alpha\delta}, \omega_{\beta\gamma})] = \\
& = \delta_{\omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}} \left[-i\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_{\gamma\beta}} + \pi\delta(\omega - \omega_{\gamma\beta}) - i\mathcal{P} \frac{1}{-\omega - \omega_{\beta\gamma}} + \pi\delta(-\omega - \omega_{\beta\gamma}) \right] \\
& = \delta_{\omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}} 2\pi\delta(\omega - \omega_{\gamma\beta}), \tag{4.172}
\end{aligned}$$

es bleibt also einfach eine Delta-Funktion übrig, die Energieerhaltung an den *Bohrschen Übergangsfrequenzen* ausdrückt. Weiterhin bleiben in

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{2\tau} [\mathcal{F}_\tau(\omega, \omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\beta}) - \mathcal{F}_\tau(-\omega, \omega_{\beta\delta}, \omega_{\beta\gamma})] = -i\delta_{\omega_{\gamma\beta}, 0} \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_{\gamma\beta}} \tag{4.173}$$

nur die Hauptwertanteile übrig. Unsere Tensoren in Gl. (4.166) vereinfachen sich also zu

$$\gamma_{\alpha\delta\gamma\beta}^\infty = \delta_{\omega_{\gamma\beta}, \omega_{\delta\alpha}} 2\pi \int d\omega \sum_{kl} \delta(\omega - \omega_{\gamma\beta}) \tilde{C}_{lk}(\omega) S_k^{\alpha\delta} S_l^{\gamma\beta} \tag{4.174}$$

$$\mathcal{H}^\infty \equiv - \sum_{\beta\gamma\delta} \delta_{\omega_{\gamma\beta}, 0} \int d\omega \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega_{\gamma\beta}} \left(\sum_{kl} \tilde{C}_{lk}(\omega) S_l^{\gamma\beta} S_k^{\beta\delta} \right). \tag{4.175}$$

In dieser Form geht die Grobkörnungs-Mastergleichung in die Form der sogenannten Born-Markov-Sekulärnäherung (BMS-Form) über. Die BMS-Form wird häufig ‘per Hand’ aus der Born-Markov-Form aufgestellt, indem schnell rotierenden Terme in der Mastergleichung vernachlässigt werden (*Sekulärnäherung*). Hier erhalten wir diese Form direkt als einen Spezialfall unserer Grobkörnungs-Mastergleichung.

AUFGABE: Überprüfe, dass man für konstante Tunnelraten $\Gamma_{L/R}$ damit die einfache Form Gl. (4.62) der Mastergleichung (ohne Zählfeld) für das Einniveausystem reproduziert.

4.6 Correlation Functions

(CARMICHAEL) Correlation functions are important since they can tell us a lot about the dynamics of dissipative systems. Moreover, they are often directly related to experimentally accessible quantities, such as photon or electron *noise*. In quantum optics, *fluctuations* of the photon field are expressed by correlations functions such as $g^{(1)}(\tau)$ and $g^{(2)}(\tau)$.

4.6.1 The Quantum Regression Theorem

We first discuss the correlation function of two *system* operators A and B

$$C_{BA}(t, \tau) \equiv \langle B(t)A(t + \tau) \rangle \equiv \text{Tr}_{\text{total}}(\chi(0)B(t)A(t + \tau)), \quad \tau > 0. \tag{4.176}$$

We insert the time evolution of the operators within the framework of a Master equation in Born approximation,

$$\chi(t) = e^{-iHt}\chi(0)e^{iHt}, \quad B(t) = e^{iHt}Be^{-iHt}, \quad A(t+\tau) = e^{iH(t+\tau)}Ae^{-iH(t+\tau)} \quad (4.177)$$

to find

$$\begin{aligned} C_{BA}(t, \tau) &= \text{Tr}_{\text{total}}(\chi(0)B(t)A(t+\tau)) \\ &= \text{Tr}_{\text{total}}\left(e^{iHt}\chi(t)Be^{-iHt}e^{iH(t+\tau)}Ae^{-iH(t+\tau)}\right) \\ &= \text{Tr}_{\text{total}}\left(e^{-iH\tau}\underline{\chi(t)}Be^{iH\tau}A\right) \\ &= \text{Tr}_{\text{total}}\left(e^{-iH\tau}\underline{\rho(t)}R_0Be^{iH\tau}A\right) \quad \text{Born Approximation} \\ &\equiv \text{Tr}_S\left(A\text{Tr}_{\text{Bath}}\left\{e^{-iH\tau}\underline{\underline{\rho(t)}}BR_0e^{iH\tau}\right\}\right) \\ &\equiv \text{Tr}_S\left(A\text{Tr}_{\text{Bath}}\left\{e^{-iH\tau}\underline{\underline{\rho_{B;t}}R_0}e^{iH\tau}\right\}\right) \\ &\equiv \text{Tr}_S(A\rho_{B;t}(\tau)). \end{aligned} \quad (4.178)$$

The correlation function can therefore be written as an expectation value of A with a ‘modified system density matrix’ $\rho_{B;t}(\tau)$ which starts at $\tau = 0$ as $\rho_{B;t}(\tau = 0) = \rho(t)B$ and evolves as a function of time $\tau > 0$.

For the time-evolution of a *system* operator \hat{O} according to

$$\hat{O}(\tau) \equiv \text{Tr}_{\text{Bath}}\left\{e^{-iH\tau}\hat{O}R_0e^{iH\tau}\right\}, \quad (4.179)$$

we can write a formal operator equation

$$\frac{d}{d\tau}\hat{O}(\tau) \equiv \mathcal{L}_\tau\hat{O}(\tau), \quad (4.180)$$

where we introduced the *super-operator* \mathcal{L}_τ .

Example: Master equation for $\hat{O} = \rho(0)$ in Born and Markov approximation, cf. Eq.(4.41)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[H_S, \rho(t)] \\ &\quad - \sum_k \left[S_k D_k \rho(t) - D_k \rho(t) S_k + \rho(t) E_k S_k - S_k \rho(t) E_k \right]. \end{aligned}$$

It is important to realise that \mathcal{L}_τ is a linear operator. We now assume that the system has a basis of kets $\{|\alpha\rangle\}$ and express the linearity of \mathcal{L}_τ by writing the matrix elements of $\mathcal{L}_\tau\hat{O}(\tau)$,

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\langle\alpha|\hat{O}(\tau)|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathcal{L}_\tau\hat{O}(\tau)|\beta\rangle = \sum_{\gamma\delta} \int_0^\tau d\tau' M_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\tau, \tau') \langle\gamma|\hat{O}(\tau')|\delta\rangle. \quad (4.181)$$

with a time-dependent *memory kernel* as a fourth-order tensor $M(\tau, \tau')$ that relates the matrix elements of the system operator \hat{O} at earlier times to its matrix elements of the (time-evolved) system operator at later times.

Using $A = |\beta\rangle\langle\alpha|$ in C_{BA} , we now have

$$\begin{aligned} C_{B,|\beta\rangle\langle\alpha|}(t, \tau) &= \langle\alpha|\rho_{B;t}(\tau)|\beta\rangle, \\ \frac{d}{d\tau}C_{B,|\beta\rangle\langle\alpha|}(t, \tau) &= \frac{d}{d\tau}\langle\alpha|\rho_{B;t}(\tau)|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathcal{L}_\tau\rho_{B;t}(\tau)|\beta\rangle \\ &= \sum_{\gamma\delta} \int_0^\tau d\tau' M_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\tau, \tau') \langle\gamma|\rho_{B;t}(\tau')|\delta\rangle \\ &= \sum_{\gamma\delta} \int_0^\tau d\tau' M_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\tau, \tau') C_{B,|\delta\rangle\langle\gamma|}(t, \tau') \end{aligned} \quad (4.182)$$

Introducing

$$\begin{aligned} k &\equiv (\alpha\beta), \quad l \equiv (\gamma\delta) \\ A_k &\equiv |\beta\rangle\langle\alpha|, \quad M_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\tau, \tau') \equiv M_{kl}(\tau, \tau'), \end{aligned} \quad (4.183)$$

we convert the tensor equation into a vector equation,

$$\frac{d}{d\tau}C_{B,A_k}(t, \tau) = \sum_l \int_0^\tau d\tau' M_{kl}(\tau, \tau') C_{B,A_l}(t, \tau') \quad (4.184)$$

which can be written in compact form using the *vector of operators*,

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \dots \\ A_k \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (4.185)$$

In vector and matrix notation, we thus obtain the *quantum regression theorem*,

$$\frac{d}{d\tau}\langle B(t)\mathbf{A}(t+\tau)\rangle = \int_0^\tau d\tau' \underline{\underline{M}}(\tau, \tau') \langle B(t)\mathbf{A}(t+\tau')\rangle, \quad \tau > 0. \quad (4.186)$$

So far, we have not made use of the *Markov approximation*.³ It turns out, however, that this results really only holds for Markovian Master equations. Within the Markov approximation, one then has a simple time-local differential (tensor) equation instead of an integro-differential (tensor) equation:

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\langle\alpha|\hat{O}(\tau)|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathcal{L}_\tau\hat{O}(\tau)|\beta\rangle = \sum_{\gamma\delta} M_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} \langle\gamma|\hat{O}(\tau)|\delta\rangle \quad (4.187)$$

³ The first derivation of the quantum regression theorem has been given by Melvin Lax, Phys. Rev. **129**, 2342 (1963). He emphasises that the only approximation one needs is the factorisation (in our notation $\chi(t) = \rho(t)R_0$, Born approximation). In the ‘Note added in proof’ in his paper he states that the derivation therefore is correct even for non-Markovian systems.

This then leads to the usual form of the quantum regression theorem as discussed in many textbooks;

$$\frac{d}{d\tau} \langle B(t) \mathbf{A}(t + \tau) \rangle = \underline{\underline{M}} \langle B(t) \mathbf{A}(t + \tau) \rangle, \quad \tau > 0. \quad (4.188)$$

The correlation function thus obeys the same equation of motion (it has the same matrix M) as the expectation value $\langle \alpha | \hat{O}(\tau) | \beta \rangle$. For $\tau < 0$, the derivation of the quantum regression theorem is analogous to the case $\tau > 0$.

4.6.2 Die Wartezeitenverteilung

Wir kommen jetzt noch einmal auf die Zerlegung Gl. (4.73) der Mastergleichung (hier ohne Zählerfelder)

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}\rho \equiv \mathcal{L}_0\rho + \mathcal{J}\rho, \quad \mathcal{J} \equiv \sum_{k=1}^M \mathcal{J}_k\rho \quad (4.189)$$

mit M Sprungoperatoren \mathcal{J}_k zurück, die zu einer Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \rho(t) &= e^{\mathcal{L}_0 t} \rho(0) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_n \dots \int_0^{t_2} dt_1 e^{\mathcal{L}_0(t-t_n)} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0(t_n-t_{n-1})} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0(t_{n-1}-t_{n-2})} \dots e^{\mathcal{L}_0(t_2-t_1)} \mathcal{J} e^{\mathcal{L}_0 t_1} \rho(0) \end{aligned} \quad (4.190)$$

führt, in der Quantensprünge (beschrieben durch Jump-Superoperatoren \mathcal{J}_k) eine nicht-unitäre Zeitentwicklung (beschrieben durch $e^{\mathcal{L}_0(t_{i+1}-t_i)}$) unterbrechen. Diese Zerlegung ist nicht eindeutig - sie hängt von der Wahl der Aufspaltung des Gesamt-Liouvillians ab. Man kann sich z.B. bei einer Messung nur für einen der M Sprungtypen interessieren, z.B. \mathcal{J}_1 , was dann zur selben Mastergleichung

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}'_0\rho + \mathcal{J}_1\rho \quad (4.191)$$

führt, die aber ein anderes Wechselwirkungsbild ('unravelling') induziert.

Wir fragen jetzt nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung $w_{kl}(\tau)$ der Zeitintervalle τ zwischen zwei Quantensprüngen vom Typ l (zuerst) und vom Typ k (danach) im stationären Zustand ρ_0 der Mastergleichung, d.h. ein Zustand mit $\mathcal{L}\rho_0 = 0$.⁴ Beispielsweise kann es sich um die Zeit zwischen zwei Photonen-Emissionen handeln. Der Zustand entwickelt sich nach zwei solcher Sprüngen gemäß

$$\rho_0 \rightarrow \mathcal{J}_k e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{J}_l \rho_0, \quad (4.192)$$

und wir setzen die Wahrscheinlichkeitsverteilung $w_{kl}(\tau)$ deshalb proportional zur Spur über diese Größe an, da uns die internen Freiheitsgrade des Systems nicht interessieren;

⁴ vgl. T. Brandes, Ann. Phys. (Berlin) **17**, 477 (2008).

$$w_{kl}(\tau) \equiv \frac{\text{Tr} \mathcal{J}_k e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{J}_l \rho_0}{I_l}, \quad I_l \equiv \text{Tr} \mathcal{J}_l \rho_0. \quad (4.193)$$

Der Faktor mit dem *Strom* $I_l \equiv \text{Tr} \mathcal{J}_l \rho_0$ ist hier so gewählt, dass eine sinnvolle Normierungsbedingung erfüllt wird. Um das einzusehen, erinnern wir uns noch einmal an unsere Super-Bra-Ket-Notation;

$$\begin{aligned} |\rho\rangle\rangle &= (\rho_{11}, \rho_{22}, \dots, \rho_{NN}, \Im\rho_{12}, \Re\rho_{12}, \dots, \Re\rho_{NN-1})^T, & \text{Dichtematrix als Vektor} \\ |0\rangle\rangle &= \rho_0, \quad \mathcal{L}\rho_0 = 0, & \text{Stationärer Zustand} \\ \langle\langle\tilde{0}| &= (1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots, 0), & \text{Zeilenvektor für Normierung} \\ \langle\langle\tilde{0}|0\rangle\rangle &= 1, & \text{Normierung des stationären Zustands.} \end{aligned} \quad (4.194)$$

Wir betrachten wieder unser Standard-Beispiel des Single-Level-Dots im Grenzfall unendlicher Spannung;

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho\rangle\rangle \equiv \mathcal{L}|\rho\rangle\rangle, \quad |\rho\rangle\rangle \equiv (p_0, p_1)^T, \quad \mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} -\Gamma_L & \Gamma_R \\ \Gamma_L & -\Gamma_R \end{pmatrix}, \quad (4.195)$$

wobei wir hier nur die Diagonalmatrixelemente $p_{0,1}$ der Dichtematrix betrachten, da die Kohärenzen entkoppeln, vgl. Gl. (4.71). Die Sprung-Superoperatoren sind

$$\mathcal{J}_R = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma_R \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |R\rangle\rangle\langle\langle\tilde{R}|, \quad |R\rangle\rangle = (1, 0)^T, \quad \langle\langle\tilde{R}| = (0, \Gamma_R) \quad (4.196)$$

$$\mathcal{J}_L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \Gamma_L & 0 \end{pmatrix} = |L\rangle\rangle\langle\langle\tilde{L}|, \quad |L\rangle\rangle = (0, 1)^T, \quad \langle\langle\tilde{L}| = (\Gamma_L, 0). \quad (4.197)$$

Wir haben sie hierbei als *dyadisches Produkt* eines Spaltenvektors (Super-Ket) mit einem Zeilenvektor (Super-Bra) geschrieben. Dadurch wird auch die Interpretation der Sprung-Superoperatoren klar: es gilt z.B.

$$\mathcal{J}_R \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \end{pmatrix} = |R\rangle\rangle\langle\langle\tilde{R}| \begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \end{pmatrix} = \Gamma_R r_1 |R\rangle\rangle. \quad (4.198)$$

Aus dem Zustand $\begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \end{pmatrix}$ wird der Leer-Zustand des Dots $|R\rangle\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, nämlich mit der Wahrscheinlichkeit $\Gamma_R r_1$ pro Zeit.

Allgemein schreiben wir die Sprung-Superoperatoren in Gl. (4.189) jetzt in der Form

$$\mathcal{J}_k \equiv |k\rangle\rangle\langle\langle\tilde{k}|, \quad k = 1, \dots, M, \quad (4.199)$$

so dass die $|k\rangle\rangle$ System-‘Zustände’ nach dem Sprung vom Typ k sind.⁵ Im obigen Beispiel

⁵ Allgemein können wir einen Sprung-Superoperator $\gamma_\mu J_\mu \rho J_\mu^\dagger$ aus der Lindblad-Form einer Mastergleichung durch Einschreiben der Systembasis-Eins als

$$|k\rangle\rangle = |n\rangle\langle m|, \quad \langle\langle\tilde{k}| \rho = \gamma_\mu \sum_{n'm'} \langle n|J_\mu|n'\rangle \langle n'|\rho|m'\rangle \langle m'|J_\mu^\dagger|m\rangle \quad (4.200)$$

schreiben. Dabei wird die Dichtematrix also in der System-Basis $\{|n\rangle\}$ also in alle Einträge (auch Ausserdiagonalelemente) zerlegt. Insbesondere ist $\langle\langle\tilde{k}|k\rangle\rangle = \gamma_\mu \langle n|J_\mu|n\rangle \langle m|J_\mu^\dagger|m\rangle = 0$, denn Quantensprünge sollten Übergängen zwischen verschiedenen Systemzuständen entsprechen.

entspricht z.B. $k = 1 = R$, $k = 2 = L$. Für die Wartezeitenverteilung $w_{kl}(\tau)$ gilt dann

$$w_{kl}(\tau) \equiv \frac{\langle\langle \tilde{k} | e^{\mathcal{L}_0 \tau} | l \rangle\rangle \langle\langle \tilde{l} | 0 \rangle\rangle}{\langle\langle \tilde{l} | 0 \rangle\rangle} = \langle\langle \tilde{k} | e^{\mathcal{L}_0 \tau} | l \rangle\rangle, \quad (4.201)$$

d.h. die stationären Ströme $I_l = \langle\langle \tilde{l} | 0 \rangle\rangle$ kürzen sich gerade weg und es bleibt das Matrixelement der Nichtsprung-Zeitentwicklung im Liouville-Raum.

Jetzt definieren wir den Super-Operator $\mathcal{W}_l(z)$ als Laplace-Transformierte von $e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{J}_l$,

$$\mathcal{W}_l(z) \equiv (z - \mathcal{L}_0)^{-1} \mathcal{J}_l, \quad (4.202)$$

wodurch die Laplace-Transformierte von $\hat{w}_{kl}(z)$ als

$$\hat{w}_{kl}(z) \equiv \int_0^\infty dt e^{-zt} w_{kl}(t) = \frac{\text{Tr} \mathcal{J}_k \mathcal{W}_l(z) \rho_0}{\text{Tr} \mathcal{J}_l \rho_0} = \langle\langle \tilde{k} | (z - \mathcal{L}_0)^{-1} | l \rangle\rangle \quad (4.203)$$

geschrieben werden kann. Für jeden anfänglichen Sprung vom Typ l muss die Wartezeitenverteilung $w_{kl}(\tau)$ bei Summation über alle folgenden Sprünge vom Typ k sowie Integration über alle Zeiten $\tau \geq 0$ insgesamt Eins ergeben. Diese Normierung folgt in der Tat aus

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau \sum_k w_{kl}(\tau) &= \sum_k \hat{w}_{kl}(0) \\ &= -\frac{\langle\langle \tilde{0} | (\mathcal{L} - \mathcal{L}_0) \mathcal{L}_0^{-1} \mathcal{J}_l | 0 \rangle\rangle}{I_l} = \frac{\langle\langle \tilde{0} | \mathcal{J}_l | 0 \rangle\rangle}{I_l} = 1. \end{aligned} \quad (4.204)$$

Hierbei haben wir benutzt, dass $\langle\langle \tilde{0} |$ linker Eigenvektor des gesamten Liouvilleans \mathcal{L} ist, $\langle 0 | \mathcal{L} = 0$, was gerade die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit zum Ausdruck bringt.

AUFGABE: Wir betrachten wieder den Single-Level-Dot im Grenzfall unendlicher Spannung;

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho\rangle \equiv \mathcal{L} |\rho\rangle, \quad |\rho\rangle \equiv (p_0, p_1)^T, \quad \mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} -\Gamma_L & \Gamma_R \\ \Gamma_L & -\Gamma_R \end{pmatrix} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{J}_R, \quad (4.205)$$

wobei in der Zerlegung hier nur die rechtsseitigen Sprünge beobachtet werden und \mathcal{J}_R wieder durch Gl. (4.196) gegeben ist. Leite das Ergebnis für die entsprechende Wartezeitenverteilung $w_R(\tau)$ zwischen zwei rechtsseitigen Sprüngen her,

$$w_R(\tau) = \Gamma_R \Gamma_L \frac{e^{-\Gamma_L \tau} - e^{-\Gamma_R \tau}}{\Gamma_R - \Gamma_L}. \quad (4.206)$$

Interpretiere dieses Ergebnis. Hinweis: Berechne zunächst $\hat{w}_R(z)$.

AUFGABE: Consider the damped oscillator with creator a^\dagger ,

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= (\mathcal{L}_0 + \mathcal{J}_e + \mathcal{J}_a) \rho = -i[\omega a^\dagger a, \rho] - \frac{\gamma_e}{2} (a^\dagger a \rho + \rho a^\dagger a - 2a \rho a^\dagger) \\ &\quad - \frac{\gamma_a}{2} (a a^\dagger \rho + \rho a a^\dagger - 2a^\dagger \rho a), \end{aligned} \quad (4.207)$$

where $\mathcal{J}_e \rho \equiv \gamma_e a \rho a^\dagger$. Calculate the waiting time distribution for photon emissions,

$$w_{ee}(\tau) = \frac{\text{Tr} \mathcal{J}_e e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{J}_e \rho_0}{\text{Tr} \mathcal{J}_e \rho_0} \quad (4.208)$$

for a thermal state ρ_0 .

4.6.3 Die $g^{(2)}(\tau)$ -Funktion

Statt der Verteilung $w_{kl}(\tau)$ der Zeiten zwischen zwei Sprüngen (ohne dass dazwischen irgendwelche anderen Sprünge stattfinden), können wir auch nach der Verteilung $g_{kl}^{(2)}(\tau)$ der Zeiten zwischen zwei Sprüngen fragen, wobei jetzt im Zeit-Intervall zwischen den zwei Sprüngen l und k auch beliebige andere Sprünge stattfinden dürfen sollen. In Analogie zu $w_{kl}(\tau) \propto \text{Tr} \mathcal{J}_k e^{\mathcal{L}_0 \tau} \mathcal{J}_l \rho_0$ definieren wir daher

$$g_{kl}^{(2)}(\tau) \propto \text{Tr} \mathcal{J}_k e^{\mathcal{L} \tau} \mathcal{J}_l \rho_0, \quad (4.209)$$

wobei jetzt statt des Nicht-Sprung Propagators $e^{\mathcal{L}_0 \tau}$ der volle Propagator $e^{\mathcal{L} \tau}$ der Mastergleichung zwischen den Sprung-Superoperatoren steht. Im Folgenden betrachten wir eine Zerlegung der Mastergleichung als

$$\dot{\rho} = \mathcal{L} \rho \equiv \mathcal{L}_0 \rho + \mathcal{J} \rho, \quad (4.210)$$

ohne den Sprung-Superoperator \mathcal{J} weiter zu zerlegen. Wir können uns z.B. eine Messung vorstellen, bei der nur ein Typ von Quantensprüngen (z.B. die spontane Emission von Photonen, Tunneln eines Elektrons aus einem Quantendot in eine bestimmte Zuleitung hinein) beobachtet wird. Dann definieren wir

$$g^{(2)}(\tau) \equiv \frac{\text{Tr} \mathcal{J} e^{\mathcal{L} \tau} \mathcal{J} \rho_0}{(\text{Tr} \mathcal{J} \rho_0)^2}. \quad (4.211)$$

Hierbei ist die Normierung so gewählt, dass eine direkte Analogie zu der Korrelationsfunktion $g^{(2)}(\tau)$ der elektrischen Feldkomponenten in der Quantenoptik hergestellt werden kann (CARMICHAEL).⁶ Eine (etwas ungenaue) erste Quantifizierung der ‘Dichte’ der aufeinanderfolgenden Quantensprünge besteht in einer Klassifikation von Verteilungen $g^{(2)}(\tau)$ gemäß ($\tau > 0$)

$$g^{(2)}(\tau) < g^{(2)}(0), \quad \text{gebündelte Sprünge (‘bunching’)} \quad (4.212)$$

$$g^{(2)}(\tau) > g^{(2)}(0), \quad \text{entbündelte Sprünge (‘antibunching’)}. \quad (4.213)$$

Bündelung (bunching) entspricht also einer erhöhten Wahrscheinlichkeit für sehr schnell (evtl. sofort) aufeinanderfolgenden Quantensprünge. Umgekehrt ist bei antibunching die

⁶ vgl. auch C. Emary, C. Pörtl, A. Carmele, J. Kabuss, A. Knorr, und T. Brandes; Phys. Rev. **85**, 165417 (2012).

Wahrscheinlichkeit für sehr schnell aufeinanderfolgenden Quantensprünge geringer als die für zeitlich etwas weiter auseinanderliegende Sprünge.

AUFGABE: Betrachte eine Zerlegung der Mastergleichung $\dot{\rho} = \mathcal{L}_0\rho + \mathcal{J}\rho$, wobei der Sprungoperator eine einfache dyadische Form $\mathcal{J} = |1\rangle\rangle\langle\langle 1|$ haben soll (d.h. bei Anwendung von \mathcal{J} auf einen Zustand $|\rho\rangle\rangle$ landet das System immer im selben Zustand $|1\rangle\rangle$ unabhängig von $|\rho\rangle\rangle$). Zeige, dass dann im Laplace-Raum der Zusammenhang

$$\hat{w}(z) = \frac{I\hat{g}^{(2)}(z)}{1 + I\hat{g}^{(2)}(z)}, \quad I \equiv \text{Tr}\mathcal{J}\rho_0 \quad (4.214)$$

zwischen der Wartezeitenverteilung und der $g^{(2)}$ -Funktion besteht.

5. DAS FLUKTUATIONSTHEOREM

Die Theorie der Quantensysteme im Nichtgleichgewicht beinhaltet ein grosse Fülle unterschiedlicher Näherungsverfahren (Greensche Funktionen, Mastergleichungen etc.), die jeweils relativ spezifischen Problemen angepaßt sind. Trotz der hohen Komplexität der Nichtgleichgewichts-Physik gibt es einige exakte Aussagen und Theoreme, die sich auf die vielleicht elementarste aller Symmetrien zurückführen lassen, nämlich die Zeitumkehrinvarianz der vollen mikroskopischen Bewegungsgleichungen.

5.1 Zeitumkehr

Die Zeitumkehr wird manchmal schon in QM I diskutiert. Sie ist ein Spezialfall der von E. Wigner eingeführten Symmetrien in der Quantenmechanik.

5.1.1 Zeitumkehroperator θ

Die Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle \quad (5.1)$$

kann auch als

$$-i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(-t)\rangle = H|\Psi(-t)\rangle \quad (5.2)$$

geschrieben werden. Hierbei ist $|\Psi(-t)\rangle$ aber noch derselbe Zustand, bloss zu Zeiten $-t$.

Wir können aber auch einen neuen Zustand

$$|\Psi_\theta(t)\rangle \equiv \theta|\Psi(t)\rangle \quad (5.3)$$

definieren (MERZBACHER), der unter der Voraussetzung

$$\theta(-i) = i\theta, \quad \theta^2 = 1, \quad \text{Zeitumkehroperator } \theta \quad (5.4)$$

wieder zu einer Zeitentwicklung mit der Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_\theta(-t)\rangle = H_\theta|\Psi_\theta(-t)\rangle, \quad H_\theta \equiv \theta H \theta \quad (5.5)$$

mit transformiertem Hamiltonian H_θ führt. Mit $t \rightarrow -t$ also

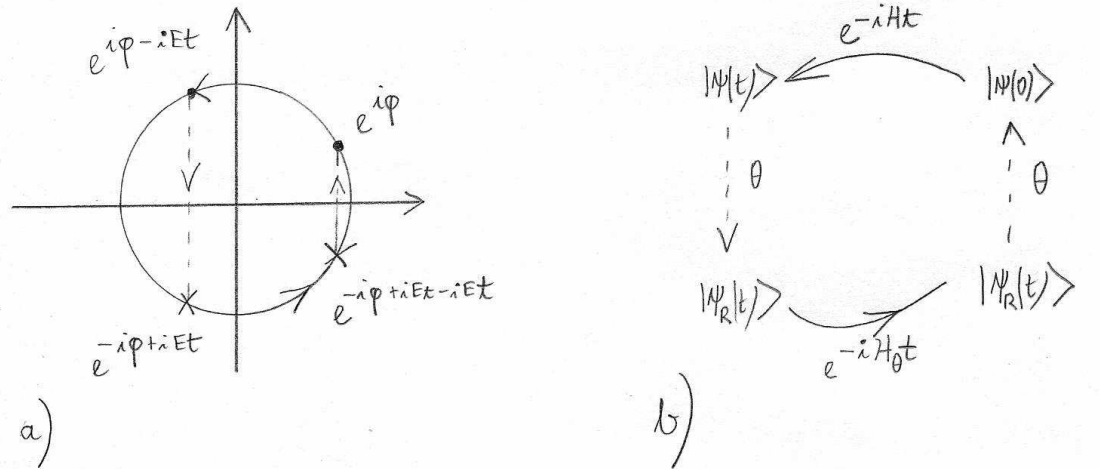


Fig. 5.1: Zeitumkehr: a) Schematisch für die Zeitentwicklung eines Phasenfaktors $e^{i\varphi}$ mit ‘Energie E ’. θ ist der Zeitumkehroperator. b) Zeitentwicklung mit der Schrödingergleichung.

$$-i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_\theta(t)\rangle = H_\theta|\Psi_\theta(t)\rangle, |\Psi_\theta(t)\rangle = e^{iH_\theta t}|\Psi_\theta(0)\rangle, \quad H_\theta \equiv \theta H \theta \quad (5.6)$$

Wir haben also ein ‘kommutatives Diagramm’ (SKIZZE) für die Zeitentwicklung von $|\Psi\rangle$ vorwärts, dann Anwenden von θ , dann ‘zurück’ zu $|\Psi_\theta(0)\rangle$, und schliesslich wieder Anwendung von θ .

Für die einfache SG in Ortsdarstellung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r}, t), \quad -i\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right)\Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (5.7)$$

ist also offensichtlich die Wellenfunktion zum Ket $|\Psi_\theta(t)\rangle$ in Ortsdarstellung

$$\langle \mathbf{r} | \Psi_\theta(t) \rangle = \Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (5.8)$$

wie wir durch Konjugiert-Komplexnehmen der SG sehen, und zwar wieder unter der Voraussetzung

$$\theta \mathbf{p}^2 \theta = \mathbf{p}^2, \quad \theta \mathbf{r} \theta = \mathbf{r}. \quad (5.9)$$

Die Zustände $|\Psi\rangle$ und $|\Psi_\theta\rangle$ sind also zwei verschiedene Zustände (linear unabhängig!)

Wir definieren jetzt

Definition Der Zeitumkehroperator θ ist ein anti-unitärer, anti-linearer Operator mit

$$\theta(\lambda|\Psi\rangle + \mu|\Phi\rangle) = \lambda^*\theta|\Psi\rangle + \mu^*\theta|\Phi\rangle, \quad \langle \theta\Phi | \theta\Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle^*. \quad (5.10)$$

Für Einteilchen-Operatoren in der Schrödingergleichung gilt

$$\theta \mathbf{p} \theta = -\mathbf{p}, \quad \theta \mathbf{r} \theta = \mathbf{r}. \quad (5.11)$$

Bei Zeitumkehr ändert sich weiterhin das Vorzeichen eines Magnetfeldes

$$\theta \mathbf{B} \theta = -\mathbf{B}. \quad (5.12)$$

Das Verhalten von Spinoperatoren und Spinoren (Spin-Wellenfunktionen) bei Zeitumkehr ist etwas komplizierter (MERZBACHER, LANDAU/LIFTSHITZ). Weitere Themen hier sind die Zeitumkehr für Operatoren in zweiter Quantisierung, Zeitumkehr in der relativistischen QM, etc.

5.1.2 Zeitabhängiger Hamiltonian

Wir betrachten jetzt eine Zeitentwicklung $U(t, 0)$ mit zeitabhängigen Hamiltonians

$$H(t), \quad 0 \leq t \leq T \quad (5.13)$$

im Zeitintervall $[0, T]$. Wir können $U(t, 0)$ approximieren durch eine Sequenz von Zeitentwicklern mit jeweils konstantem Hamiltonian;

$$U(t_n, 0) \approx e^{-iH_n \Delta t} e^{-iH_{n-1} \Delta t} \dots e^{-iH_1 \Delta t} e^{-iH_0 \Delta t}, \quad \Delta t \equiv \frac{T}{N}, \quad (5.14)$$

wobei hier am Schluss der Limes $N \rightarrow \infty$ genommen werden soll. Die Zeit t_n entspricht t , die Zeit t_N entspricht T , also z.B.

$$U(t_N, 0) \approx e^{-iH_N \Delta t} e^{-iH_{N-1} \Delta t} \dots e^{-iH_1 \Delta t} e^{-iH_0 \Delta t}, \quad \Delta t \equiv \frac{T}{N}. \quad (5.15)$$

Jetzt soll eine weitere Zeitentwicklung $U_R(T, 0)$ betrachtet werden, in der die Sequenz der Zeitentwickler genau rückwärts durchlaufen wird, und zwar angefangen mit dem zeitumgekehrten Hamiltonian $H_\theta(T)$ bis zum zeitumgekehrten Hamiltonian $H_\theta(0)$. In diskreter Version also

$$\begin{aligned} U_R(t_N, 0) &\approx e^{-iH_{\theta,0} \Delta t} e^{-iH_{\theta,1} \Delta t} \dots e^{-iH_{\theta,N-1} \Delta t} e^{-iH_{\theta,N} \Delta t} \\ &= \theta e^{iH_0 \Delta t} e^{iH_1 \Delta t} \dots e^{iH_{N-1} \Delta t} e^{iH_N \Delta t} \theta \end{aligned} \quad (5.16)$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ also

$$U_R(T, 0) = \theta U^\dagger(T, 0) \theta. \quad (5.17)$$

Wir haben also eine interessante Interpretation der ansonsten trivialen Gleichung $\rho_0 = \rho_0$, umgeschrieben als

$$\begin{aligned} \theta \underbrace{\rho_0}_{\equiv \rho_R(T)} \theta &= U_R(T, 0) \theta \underbrace{U(T, 0) \rho_0 U^\dagger(T, 0)}_{\rho(T) \equiv \rho_R(0)} \theta U_R^\dagger(T, 0) \\ \rightsquigarrow \rho_R(T) &= U^\dagger(T, 0) \rho_R(0) U(T, 0). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Das verallgemeinert die Rückwärts-Zeitentwicklung der einfachen SG für zeitunabhängige Hamiltonians,

$$|\Psi(0)\rangle = e^{iHT}U^\dagger(T,0)|\Psi(T)\rangle, \quad (5.19)$$

auf Dichtematrizen und zeitabhängige Hamiltonians.

5.1.3 Zweipunktmessungen

Wir betrachten zunächst die Vorwärts-Zeitentwicklung und fragen nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[a_T, a_0]$ ¹ für die Messwerte a_0 und a_T einer Observablen \hat{A} zur Zeit $t = 0$ und zur Zeit $t = T$. Nach dem von-Neumann-Postulat ist diese Wahrscheinlichkeitsverteilung für projektive Messungen durch

$$P[a_T, a_0] = \text{Tr} \left(\hat{P}_{a_T} U(T, 0) \hat{P}_{a_0} \rho_0 \hat{P}_{a_0} U^\dagger(T, 0) \hat{P}_{a_T} \right) \quad (5.20)$$

gegeben, wobei \hat{P}_a der Projektor auf den Unterraum zum gemessenen Eigenwert a der Observablen \hat{A} ist: Die erste Messung projiziert auf den Unterraum zu a_0 , dann erfolgt eine unitäre Zeitentwicklung, und schliesslich erfolgt eine weitere Projektion auf den Unterraum zu a_T . Wir schreiben die Projektoren explizit in einer Basisentwicklung als

$$\hat{P}_{a_0} = \sum_i |a_0 i\rangle \langle a_0 i|, \quad \hat{P}_{a_T} = \sum_j |a_T j\rangle \langle a_T j|, \quad (5.21)$$

Die Basis $|a_0 i\rangle$ soll den Anfangszustand ρ_0 diagonalisieren. Dann haben wir

$$\begin{aligned} P[a_T, a_0] &= \text{Tr} \sum_{ijj'} \left(|a_T j\rangle \langle a_T j| U(T, 0) |a_0 i\rangle \langle a_0 i| \rho_0 |a_0 i\rangle \langle a_0 i| U^\dagger(T, 0) |a_T j'\rangle \langle a_T j'| \right) \\ &= \sum_{ij} P[a_T j; a_0 i], \quad P[a_T j; a_0 i] \equiv |\langle a_T j| U(T, 0) |a_0 i\rangle|^2 \langle a_0 i| \rho_0 |a_0 i\rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Jetzt betrachten wir die Rückwärts-Zeitentwicklung Gl. (5.18),

$$\rho_R(T) = \theta U_R(T, 0) \theta \rho_R(0) \theta U_R^\dagger(T, 0) \theta \quad (5.23)$$

und die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_R[a_0, a_T]$ für die Messwerte a_T bei der ersten und a_0 bei der zweiten Messung, also auch in umgekehrter Reihenfolge. Wiederum wird diese unitäre Rückwärts-Zeitentwicklung von den zwei Projektionen unterbrochen, und wir haben

$$P_R[a_0, a_T] = \text{Tr} \left(\hat{P}_{a_0} \theta U_R(T, 0) \hat{P}_{a_T} \theta \rho_R(0) \theta \hat{P}_{a_T} U_R^\dagger(T, 0) \theta \hat{P}_{a_0} \right) \quad (5.24)$$

Wenn wir

$$[\theta, \hat{P}_{a_T}] = 0 \quad (5.25)$$

¹ M. Esposito, U. Harbola, S. Mukamel, Rev. Mod. Phys. **81**, 1665 (2009).

benutzen (DISKUTIEREN), ergibt sich mit Gl. (5.17)

$$P_R[a_0, a_T] = \text{Tr} \left(\hat{P}_{a_0} U^\dagger(T, 0) \hat{P}_{a_T} \rho_R(0) \hat{P}_{a_T} U(T, 0) \hat{P}_{a_0} \right). \quad (5.26)$$

Analog schieben wir wieder eine Projektordarstellung wie in Gl. (5.21) ein,

$$\hat{P}_{a_0} = \sum_k |a_0 k\rangle \langle a_0 k|, \quad \hat{P}_{a_T} = \sum_l |a_T l\rangle \langle a_T l|, \quad (5.27)$$

Die Basis $|a_T l\rangle$ soll jetzt den Anfangszustand $\rho_R(0)$ der Rückentwicklung diagonalisieren;

$$\begin{aligned} P_R[a_0, a_T] &= \text{Tr} \sum_{kk'l} \left(|a_0 k\rangle \langle a_0 k| U^\dagger(T, 0) |a_T l\rangle \langle a_T l| \rho_R(0) |a_T l\rangle \langle a_T l| U(T, 0) |a_0 k'\rangle \langle a_0 k'| \right) \\ &= \sum_{kl} P_R[a_0 k; a_T l], \quad P_R[a_0 k; a_T l] \equiv |\langle a_T l| U(T, 0) |a_0 k\rangle|^2 \langle a_T l| \rho_R(0) |a_T l\rangle. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Insbesondere wählen wir jetzt die Basis für Vorwärts- und Rückwärtsentwicklung so, dass $|a_T l\rangle = |a_T j\rangle$ (diagonalisiert $\rho_R(0)$) und $|a_0 k\rangle = |a_0 i\rangle$ (diagonalisiert $\rho(0)$). Dann haben wir

$$\begin{aligned} P[a_T j; a_0 i] &\equiv |\langle a_T j| U(T, 0) |a_0 i\rangle|^2 \langle a_0 i| \rho_0 |a_0 i\rangle & (5.29) \\ P_R[a_0 i; a_T j] &\equiv |\langle a_T j| U(T, 0) |a_0 i\rangle|^2 \langle a_T j| \rho_R(0) |a_T j\rangle. & (5.30) \end{aligned}$$

Das Betragsquadrat ist in beiden Wahrscheinlichkeiten gleich und beschreibt gerade die *mikroskopische Reversibilität* der Zeitentwicklung zwischen Zuständen $|a_0 i\rangle$ und $|a_T j\rangle$. Der Unterschied der beiden Wahrscheinlichkeiten ist nur durch die jeweilige Anfangsbedingung gegeben, d.h. durch die Diagonalelemente von ρ_0 bzw. $\rho_R(0)$.

5.2 Fluktuationstheoreme

Aus der mikroskopischen Reversibilität folgen exakte Theoreme über Nichtgleichgewichtsprozesse, wenn auf die makroskopische Thermodynamik (z.B. Gibbs-Zustände) Bezug genommen wird.²

5.2.1 Fluktuationstheorem der Arbeit

Wir betrachten jetzt eine Zeitentwicklung im Intervall $[0, T]$ zwischen zwei thermischen Zuständen zur Zeit $t = 0$ und $t = T$,

$$\rho(0) = e^{-\beta(H(0)-F(0))}, \quad \rho(T) \equiv e^{-\beta(H(T)-F(T))} \quad (5.31)$$

mit den zugehörigen Freien Energien $F(0) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} e^{-\beta H(0)}$ und $F(T) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} e^{-\beta H(T)}$. Für die Vorwärtszeitentwicklung wird zunächst $\rho(0)$ durch thermischen Kontakt mit einem Bad präpariert, das zur Zeit $t = 0$ weggenommen wird, woraufhin die Energie E_0

² M. Campisi, P. Hänggi, P. Talkner; arXiv:1012.2268 (2011).

des Systems gemessen wird. Dann erfolgt die Zeitentwicklung mit zeitabhängigem Hamiltonian $H(t)$ mit der zweiten Messung mit Ergebnis E_T am Schluss der Zeitentwicklung zur Zeit $t = T$. Der Hamiltonian bleibt dann konstant $H(T)$ und das System wird wieder thermalisiert. Der Anfangszustand der Rückwärtsentwicklung ist dann $\rho(T)$, und die Energie wird wieder zweimal hintereinander gemessen.

Wir definieren für dieses ‘Messprotokoll’ die Größe

$$w \equiv E_T - E_0, \quad \text{Arbeit (Vorwärtsprozess)} \quad (5.32)$$

$$w \equiv E_0 - E_T, \quad \text{Arbeit (Rückwärtsprozess)}. \quad (5.33)$$

als Energiedifferenz. Für die Arbeit im Sinne der Thermodynamik läßt sich nämlich eine quantenmechanische Observable nicht richtig definieren, insbesondere wenn man einen zeitabhängigen Hamiltonian hat. Dahingegen ist die Größe w durch das Messprotokoll immer wohldefiniert. Weil das System im Intervall $[0, T]$ isoliert ist, d.h. nicht mit einem Wärmebad in Kontakt steht, ist nach dem ersten Hauptsatz

$$\Delta U = \Delta W + \Delta Q = \Delta W, \quad (5.34)$$

die Änderung der inneren Energie ist also gerade die verrichtete Arbeit.

Wir können nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(w)$ (und entsprechend $p_R(w)$ für den Rückprozess) fragen, um damit z.B. Mittelwerte oder Fluktuationen zu berechnen. Wir haben

$$\begin{aligned} p(w) &\equiv \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_T - E_0)) \sum_{ij} P[E_T j, E_0 i] \\ &= \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_T - E_0)) \sum_{ij} |\langle E_T j | U(T, 0) | E_0 i \rangle|^2 \langle E_0 i | \rho_0 | E_0 i \rangle \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned} p_R(w) &\equiv \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_0 - E_T)) \sum_{ij} P_R[E_0 i, E_T j] \\ &= \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_0 - E_T)) \sum_{ij} |\langle E_T j | U(T, 0) | E_0 i \rangle|^2 \langle E_T j | \rho_R(0) | E_T j \rangle \end{aligned} \quad (5.36)$$

Wir erkennen bereits, dass das zwei sehr ähnliche Ausdrücke sind. Statt $p_R(w)$ betrachten wir $p_R(-w)$; dann sind die Delta-Funktionen gleich. Weiterhin durch Einsetzen

$$p(w) = \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_T - E_0)) \sum_{ij} |\langle E_T j | U(T, 0) | E_0 i \rangle|^2 e^{-\beta(E_0 - F(0))} \quad (5.37)$$

$$p_R(-w) = \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_T - E_0)) \sum_{ij} |\langle E_T j | U(T, 0) | E_0 i \rangle|^2 e^{-\beta(E_T - F(T))}. \quad (5.38)$$

Ganz wichtig ist hier, dass das Matrixelement der thermischen Zustände nur von der makroskopischen Variable Energie (E_T bzw. E_0) und nicht von den mikroskopischen

Zuständen i bzw. j abhängt. Wegen der Delta-Funktion mit $w = (E_T - E_0)$ folgt insbesondere

$$\begin{aligned} p_R(-w) &= \sum_{E_T, E_0} \delta(w - (E_T - E_0)) \sum_{ij} |\langle E_T j | U(T, 0) | E_0 i \rangle|^2 e^{-\beta(w + E_0 - F(T))} \\ &= e^{-\beta(w - F(T) + F(0))} p(w), \end{aligned} \quad (5.39)$$

oder umgeschrieben

$$\frac{p(w)}{p_R(-w)} = e^{\beta(w - \Delta F)}, \quad \Delta F \equiv F(T) - F(0), \quad \text{Tasaki-Crooks-Beziehung.} \quad (5.40)$$

Wir erhalten also einen exakten Zusammenhang der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Vorwärts- und Rückwärtsprozess, der nur die inverse Temperatur β und die *Differenz der Freien Energien* ΔF des Anfangs- und Endzustands benutzt.

Aus der Tasaki-Crooks-Beziehung folgt durch Integration über w wegen der Normierung von $p_R(w)$ sofort eine weitere wichtige Relation,

$$\langle e^{-\beta w} \rangle \equiv \int dw p(w) e^{-\beta w} = \underbrace{\int dw p_R(-w) e^{-\beta \Delta F}}_1 = e^{-\beta \Delta F} \quad (5.41)$$

nämlich die bereits früher entdeckte Beziehung

$$\langle e^{-\beta w} \rangle = e^{-\beta \Delta F}, \quad \text{Jarzynski-Beziehung.} \quad (5.42)$$

DISKUSSION:

- Ein analoges Fluktuationstheorem der Arbeit w kann auch für Systeme hergeleitet werden, die während der Zeitentwicklung im thermischen Kontakt mit einem Gleichgewichtsbad stehen.
- Anwendung findet das Fluktuationstheorem für die Arbeit für die Bestimmung von Freien Energien z.B. von Molekülen: man misst die Arbeit für Vorwärts- und Rückwärtsprozess und bestimmt daraus die Differenzen der Freien Energien.

5.2.2 Austausch-Fluktuationstheorem

Wir betrachten jetzt einen zeitabhängigen Hamiltonian

$$H(t) = H_{\text{res}} + V(t), \quad H_{\text{res}} \equiv \sum_{\alpha} H_{\alpha}, \quad (5.43)$$

in dem Teilchenreservoir α über eine zeitabhängige Wechselwirkung $V(t)$ miteinander gekoppelt sind. Ein Beispiel sind zwei Reservoir $\alpha = L, R$, die über eine Tunnelbarriere gekoppelt werden, die geöffnet und dann wieder geschlossen wird.

Wir betrachten einen faktorisierenden Anfangszustand des Gesamtsystems

$$\rho(0) = \prod_{\alpha} \rho_{\alpha} \otimes \rho_V, \quad \rho_{\alpha} = \frac{e^{-\beta_{\alpha}(H_{\alpha} - \mu_{\alpha} N_{\alpha})}}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \quad (5.44)$$

mit großkanonischen Gleichgewichtszuständen der Reservoirs und einem Anfangszustand ρ_V des Rest-Systems.

Zur Zeit $t = 0$ werden die Teilchenzahlen N_{α} und Energien H_{α} in den Reservoirs α *gleichzeitig* gemessen, was möglich ist, wenn wir

$$[H_{\alpha}, H_{\beta}] = [N_{\alpha}, H_{\beta}] = [N_{\alpha}, N_{\beta}] = 0 \quad (5.45)$$

annehmen.

OFFENE FRAGE: Wie ist das für andere Observable wie Impuls oder Drehimpuls? Eine entsprechende Messung erfolgt zur Zeit $T = 0$. Dann haben wir wieder

$$P[a_T j; a_0 i] \equiv |\langle a_T j | U(T, 0) | a_0 i \rangle|^2 \langle a_0 i | \rho_0 | a_0 i \rangle \quad (5.46)$$

für die Wahrscheinlichkeit $a_0 \equiv \{n_{\alpha,0}, E_{\alpha,0}\}$ zur Zeit $t = 0$ sowie $a_T \equiv \{n_{\alpha,T}, E_{\alpha,T}\}$ zur Zeit $t = T$ zu messen, und zwar für einen Übergang des Gesamtsystem vom Anfangszustand i zum Endzustand j . Entsprechend ist jetzt für die Rückwärtsentwicklung

$$P_R[a_0 i; a_T j] \equiv |\langle a_T j | U(T, 0) | a_0 i \rangle|^2 \langle a_T j | \rho_R(0) | a_T j \rangle, \quad (5.47)$$

vgl. Gl. (5.29). Wie beim Fluktuationstheorem der Arbeit betrachten wir jetzt wieder

$$p(\Delta a) \equiv \sum_{a_0, A_T} \delta(\Delta a - (a_T - a_0)) \sum_{ij} |\langle a_T j | U(T, 0) | a_0 i \rangle|^2 \rho_{\text{res}}(a_0) \langle a_0 i | \rho_V | a_0 i \rangle \quad (5.48)$$

wobei die Delta-Funktion und die Summe jetzt mehrdimensional sind;

$$\delta(\Delta a - (a_T - a_0)) \equiv \prod_{\alpha} \delta(\Delta E_{\alpha} - (E_{\alpha,T} - E_{\alpha,0})) \delta(\Delta n_{\alpha} - (n_{\alpha,T} - n_{\alpha,0})) \quad (5.49)$$

$$\sum_{a_0, A_T} \equiv \sum_{\alpha} \sum_{n_{\alpha,0} n_{\alpha,T}} \sum_{E_{\alpha,0} E_{\alpha,T}}, \quad \rho_{\text{res}}(a_0) \equiv \prod_{\alpha} \frac{e^{-\beta_{\alpha}(E_{\alpha,0} - \mu_{\alpha} n_{\alpha,0})}}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \quad (5.50)$$

Für die Rückwärtsentwicklung soll jetzt wieder ein faktorisierender Zustand angenommen werden

$$\rho_R(0) = \prod_{\alpha} \rho_{\alpha} \otimes \rho'_V, \quad \rho_{\alpha} = \frac{e^{-\beta_{\alpha}(H_{\alpha} - \mu_{\alpha} N_{\alpha})}}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \quad (5.51)$$

sowie zwei Messungen mit den Ergebnissen a_T (zuerst) und a_0 (danach). Dann ist

$$\begin{aligned} p_R(-\Delta a) &\equiv \sum_{a_0, A_T} \delta(-\Delta a - (a_0 - a_T)) \sum_{ij} |\langle a_T j | U(T, 0) | a_0 i \rangle|^2 \rho_{\text{res}}(a_T) \langle a_T j | \rho'_V | a_T j \rangle \\ p(\Delta a) &\equiv \sum_{a_0, A_T} \delta(\Delta a - (a_T - a_0)) \sum_{ij} |\langle a_T j | U(T, 0) | a_0 i \rangle|^2 \rho_{\text{res}}(a_0) \langle a_0 i | \rho_V | a_0 i \rangle \end{aligned} \quad (5.52)$$

Ohne die Faktoren $\langle a_T j | \rho'_V | a_T j \rangle$, $\langle a_0 i | \rho_V | a_0 i \rangle$ hätten wir wegen

$$\rho_{\text{res}}(a_0) = \rho_{\text{res}}(a_T - \Delta a) = \prod_{\alpha} \frac{e^{-\beta_{\alpha}([E_{\alpha,T} - \Delta E_{\alpha}] - \mu_{\alpha}[n_{\alpha,T} - \Delta n_{\alpha}])}}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \quad (5.53)$$

$$= \rho_{\text{res}}(a_T) \prod_{\alpha} e^{\beta_{\alpha}(\Delta E_{\alpha} - \mu_{\alpha} \Delta n_{\alpha})}, \quad (5.54)$$

und damit sofort wieder wie beim Fluktuationstheorem der Arbeit einen ‘universellen Quotienten’³

$$\frac{p(\{\Delta E_{\alpha}, \Delta n_{\alpha}\})}{p_R(\{-\Delta E_{\alpha}, -\Delta n_{\alpha}\})} = \prod_{\alpha} e^{\beta_{\alpha}(\Delta E_{\alpha} - \mu_{\alpha} \Delta n_{\alpha})}, \quad \text{Austausch-FT.} \quad (5.55)$$

So wird das Austausch-Fluktuationstheorem normalerweise formuliert, wobei die Zustände ρ_V und ρ'_V , d.h. dynamische Freiheitsgrade der Kopplung V zwischen den Reservoiren α gar nicht berücksichtigt werden. Physikalisch kann man argumentieren, dass zumindest für lange Zeiten T solche ‘System-Anfangsbedingungen’ keine Rolle spielen sollten.

Alternativ können wir fordern, dass

$$\frac{\langle a_T - \Delta a, i | \rho_V | a_T - \Delta a, i \rangle}{\langle a_T j | \rho'_V | a_T j \rangle} = f(\Delta a) \quad (5.56)$$

nur eine Funktion von Δa sein soll: dann erscheint $f(\Delta a)$ als zusätzlicher Faktor auf der rechten Seite von Gl. (5.55).

5.3 Fluktuationstheorem und Zählstatistik

Als erste Anwendung betrachten wir die Zählstatistik wechselwirkungsfreier Fermionen im elastischen Transport (elastische Streuung) zwischen zwei Reservoiren L und R , die durch eine Streuregion miteinander verbunden sind (*Zwei-Terminal-Messung*). In diesem Fall ist in Gl. (5.55) $\Delta E_{\alpha} = 0$, und das Austausch-Fluktuationstheorem lautet für gleiche Temperaturen $\beta_L = \beta_R$

$$\frac{p(\{\Delta n_{\alpha}\})}{p_R(\{-\Delta n_{\alpha}\})} = \prod_{\alpha=L,R} e^{-\beta \mu_{\alpha} \Delta n_{\alpha}}. \quad (5.57)$$

In der Tat läßt sich das noch vereinfachen wegen

$$\Delta n_R = -\Delta n_L \equiv n. \quad (5.58)$$

Wir haben also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P(n, t)}{P_R(-n, t)} = e^{\beta(\mu_L - \mu_R)n} \quad (5.59)$$

³ D. Andrieux, P. Gaspard, T. Monnai, S. Tasaki, New J. Phys. **11**, 043014 (2009).

mit der Wahrscheinlichkeit $P(n, t)$, dass nach der Zeit t in einem Reservoir (z.B. in R) n zusätzliche Fermionen gemessen wurden.

Aus dieser Formel folgt eine Symmetrie der momentenerzeugenden Funktion $g_\lambda(t)$ und der kumulantenerzeugende Funktion (CGF)

$$\mathcal{G}_\lambda(t) \equiv \ln g_\lambda(t) = \ln \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P(n, t), \quad (5.60)$$

Gl. (3.90), Gl. (3.110). Hierzu schreiben wir

$$\begin{aligned} \sum_n e^{i\lambda n} P(n, t) &= \sum_n e^{i\lambda n} P_R(-n, t) e^{\beta(\mu_L - \mu_R)n} \\ &= \sum_n e^{-i\lambda n} P_R(n, t) e^{-\beta(\mu_L - \mu_R)n}, \quad t \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Daraus folgt für die durch die Zeit t dividierten CGF (vorwärts und rückwärts)

$$\mathcal{S}_{(R)}(\lambda) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P_{(R)}(n, t) \quad (5.62)$$

die Symmetriebeziehung

$$\boxed{\mathcal{S}(\lambda) = \mathcal{S}_R(-\lambda + i\beta(\mu_L - \mu_R)).} \quad (5.63)$$

5.3.1 Levitov-Lesovik-Formel

Wir erhalten das Ergebnis Gl. (5.59) auch direkt aus der Levitov-Lesovik-Formel Gl. (3.145) für die Zählstatistik wechselwirkungsfreier Fermionen zwischen zwei Reservoiren L und R , d.h. der kumulantenerzeugende Funktion (CGF)

$$\mathcal{G}_\lambda(t) \equiv \ln g_\lambda(t) = \ln \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P(n, t), \quad (5.64)$$

Gl. (3.90), Gl. (3.110) mit der Wahrscheinlichkeit $P(n, t)$, Gl. (3.86), das nach der Zeit t in einem Reservoir (z.B. in R) n zusätzliche Fermionen gemessen wurden. Die Levitov-Lesovik-Formel gibt für lange Zeiten den expliziten Ausdruck

$$\mathcal{S}(\lambda) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \mathcal{G}_\lambda(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \ln(1 + T(\omega) h_\lambda(\omega)) \quad (5.65)$$

$$h_\lambda(\omega) = (e^{i\lambda} - 1)(1 - f_R(\omega)) f_L(\omega) + (e^{-i\lambda} - 1)(1 - f_L(\omega)) f_R(\omega), \quad (5.66)$$

den wir oben abgeleitet hatten.

Die Funktion $h_\lambda(\omega)$ erfüllt nun eine Symmetrie, die aus den Fermifunktionen $f_\alpha(\omega) = (e^{\beta(\omega - \mu_\alpha)} + 1)^{-1}$ (mit $\alpha = L, R$) folgt: Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} f_L(\omega)(1 - f_R(\omega)) e^{-i\lambda - \beta(\mu_L - \mu_R)} &= \frac{1}{e^{\beta(\omega - \mu_L)} + 1} \frac{e^{\beta(\omega - \mu_R)}}{e^{\beta(\omega - \mu_R)} + 1} e^{-i\lambda - \beta(\mu_L - \mu_R)} \\ &= f_R(\omega)(1 - f_L(\omega)) e^{-i\lambda}, \end{aligned} \quad (5.67)$$

und damit durch Ersetzen von $\lambda \rightarrow -\lambda + i\beta V$ in Gl. (5.65)

$$h_\lambda(\omega) = h_{-\lambda+i\beta eV}(\omega), \quad eV \equiv \mu_L - \mu_R \quad (5.68)$$

mit der Spannung $eV = \mu_L - \mu_R$ (Elementarladung e wieder eingesetzt). Daraus folgt für die Funktion $\mathcal{S}(\lambda)$ die exakte Symmetrie

$$\mathcal{S}(\lambda) = \mathcal{S}(-\lambda + i\beta eV), \quad eV \equiv \mu_L - \mu_R. \quad (5.69)$$

Wir beachten, dass wir hier nicht zwischen dem ‘vorwärts’ \mathcal{S} und dem ‘rückwärts’ \mathcal{S}_R unterschieden haben. Die Zeitentwicklung soll in beide Richtungen mit demselben Hamiltonian ablaufen, insbesondere ist also hier zunächst kein Magnetfeld \mathbf{B} zugelassen (vgl. weiter unten).

Die Symmetrie von $\mathcal{S}(\lambda)$ überträgt sich damit auch auf die momentenerzeugende Funktion $g_\lambda(t)$ im Langzeit-Limes. Für die Wahrscheinlichkeiten $P(n, t)$ bedeutet das umgekehrt wiederum ($t \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} P(n, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} g_\lambda(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} e^{t\mathcal{S}(\lambda)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{-i\lambda n} e^{t\mathcal{S}(-\lambda+i\beta eV)} = [\lambda' = -\lambda + i\beta eV] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi+i\beta eV}^{\pi+i\beta eV} d\lambda' e^{i\lambda' n} e^{t\mathcal{S}(\lambda')} e^{\beta eV n} = P(-n, t) e^{\beta eV n}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Das letzte Integral ist hierbei nach oben in die komplexe Ebene verschoben. Wir können dann eine geschlossene Integrationskurve definieren, wobei sich wegen der 2π -Periodizität von $\mathcal{S}(\lambda') = \mathcal{S}(\lambda' + 2\pi k)$ die Beiträge auf den zwei senkrechten Stücken wegheben. Unter der Annahme, dass $e^{t\mathcal{S}(\lambda')}$ analytisch ist (CHECK), ist nach dem Cauchy-Integralsatz das gesamte Wegintegral Null, und das verschobene Integral ist mit dem unverschobenen identisch (SKIZZE ⁴). Es gilt also das Austausch-Fluktuationstheorem im stationären Langzeit-Limes,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P(n, t)}{P(-n, t)} = e^{\beta eV n}. \quad (5.71)$$

5.3.2 Kumulanten von $P(n, t)$

Jetzt diskutieren wir die Kumulanten der Zählstatistik $P(n, t)$. Die k -te Kumulante $c_k(t)$ ist als k -te Ableitung der CGF nach dem Zählfeld λ definiert,

$$c_k(t) \equiv \left. \frac{\partial^k}{\partial (i\lambda)^k} \mathcal{G}_\lambda(t) \right|_{\lambda=0} \quad (5.72)$$

Für lange Zeiten t sind wegen $\mathcal{G}_\lambda(t) \propto t\mathcal{S}(\lambda)$ alle Kumulanten linear in t . Man definiert deshalb die *Kumulanten des Stroms*

⁴ vgl. SKRIPT G. SCHALLER.

$$\langle\langle I^k \rangle\rangle \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{c_k(t)}{t} = \left. \frac{\partial^k}{\partial (i\lambda)^k} \mathcal{S}(\lambda) \right|_{\lambda=0}. \quad (5.73)$$

Die erste Kumulante lautet

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \left. \frac{\partial}{\partial (i\lambda)} \ln \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda n} P(n, t) \right|_{\lambda=0} = \frac{\sum_{n=-\infty}^{\infty} n P(n, t)}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n, t)} = \langle n \rangle_t \\ &\rightarrow t \langle I \rangle, \end{aligned} \quad (5.74)$$

wobei $\langle I \rangle$ der stationäre Strom durch das System ist. Also ist

$$\langle\langle I^1 \rangle\rangle = \langle I \rangle \quad (5.75)$$

Die zweite Kumulante ist die Varianz der Verteilung $P(n, t)$,

$$c_2(t) = \langle n^2 \rangle_t - \langle n \rangle_t^2. \quad (5.76)$$

Sie kann mit dem *Rauschspektrum* des Stroms in Verbindung gebracht werden:

Satz 7 (MacDonald-Formel). *Sei*

$$C_{II}(t) \equiv \frac{1}{2} \langle \hat{I}(t) \hat{I}(0) + \hat{I}(0) \hat{I}(t) \rangle - \langle \hat{I}(0) \rangle^2, \quad \hat{I}(t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} \hat{N}(t) \quad (5.77)$$

die symmetrisierte Korrelationsfunktion des Stromoperators $\hat{I}(t)$ im stationären Zustand und

$$S_{II}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C_{II}(t) \quad (5.78)$$

deren Fouriertransformierte. Dann gilt die MacDonald-Formel

$$S_{II}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{\infty} dt [\omega \sin \omega t + \eta \cos \omega t] e^{-\eta t} \frac{d}{dt} [\langle n^2 \rangle_t - \langle n \rangle_t^2]. \quad (5.79)$$

Zum Beweis der MacDonald-Formel siehe ⁵. Insbesondere folgt als Lemma der Zusammenhang zwischen der Varianz $c_2(t)$ der Zählstatistik und dem Spektrum der Stromfluktuationen,

$$S_{II}(0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} [\langle n^2 \rangle_t - \langle n \rangle_t^2] = \langle\langle I^2 \rangle\rangle. \quad (5.80)$$

⁵ siehe z.B. C. Flindt, T. Novotny, A.-P. Jauho, *Physica E* **29**, 411 (2005), oder N. Lambert, R. Aguado, T. Brandes, *Phys. Rev. B* **75**, 045340 (2007).

5.4 Onsager-Relationen

Aus dem Austausch-Fluktuationstheorem Gl. (5.55) können nun weitere Relationen abgeleitet werden, die z.B. Symmetrien von Transportkoeffizienten beschreiben. Solche Symmetriebetrachtungen haben eine lange Geschichte und gehen auf Onsager (1931) zurück, vgl. auch LANDAU/LIFSHITZ Bd. 5, §120. Wir beginnen mit einer ‘moderneren’ Herleitung aus dem Fluktuationstheorem für eine CGF, wenden uns dann nochmals der (Quanten-)Theorie der linearen Antwort zu, und kommen dann auf eine mehr thermodynamische Sichtweise zu sprechen.

5.4.1 Zwei-Terminal-Messung

Wir beginnen wieder mit dem Transport von Fermionen in einer Zwei-Terminal-Messung und der durch die Zeit t dividierten CGF Gl. (5.63),

$$\mathcal{S}(\lambda) = \mathcal{S}_R(-\lambda + i\mathcal{A}), \quad \mathcal{A} \equiv \beta(\mu_L - \mu_R), \quad \text{‘Affinität’}. \quad (5.81)$$

Es ist nützlich, (anti-)symmetrisierte Größen einzuführen ⁶,

$$\mathcal{S}_{\pm}(\lambda) \equiv \mathcal{S}(\lambda) \pm \mathcal{S}_R(\lambda) \rightsquigarrow \mathcal{S}_{\pm}(\lambda) = \pm \mathcal{S}_{\pm}(-\lambda + i\mathcal{A}). \quad (5.82)$$

Wir entwickeln die k -te Stromkumulante Gl. (5.73) in eine Potenzreihe der Affinität \mathcal{A} ,

$$\langle\langle I^k \rangle\rangle \equiv \left. \frac{\partial^k}{\partial (i\lambda)^k} \mathcal{S}(\lambda) \right|_{\lambda=0} = \sum_{l=0}^{\infty} L_l^k \frac{\mathcal{A}^l}{l!} \quad (5.83)$$

mit Koeffizienten L_l^k , die wir als Transportkoeffizienten interpretieren werden. Die CGF läßt sich umgekehrt durch die Kumulanten ausdrücken;

$$\mathcal{S}(\lambda) = \sum_k \frac{(i\lambda)^k}{k!} \langle\langle I^k \rangle\rangle = \sum_k \frac{(i\lambda)^k \mathcal{A}^l}{k!l!} L_l^k. \quad (5.84)$$

Entsprechend geht das für $\mathcal{S}_{\pm}(\lambda)$, d.h.

$$\mathcal{S}_{\pm}(\lambda) = \sum_k \frac{(i\lambda)^k \mathcal{A}^l}{k!l!} L_{l,\pm}^k, \quad L_{l,\pm}^k \equiv L_l^k \pm L_l^k(R), \quad (5.85)$$

wobei $L_l^k(R)$ den Transportkoeffizienten zu $\mathcal{S}_R(\lambda)$ bezeichnet, der zum zeitumgekehrten Hamiltonian H_{θ} gehört.

Aus der Fluktuationsrelation Gl. (5.82) für die CGF können nun Beziehungen zwischen den Transportkoeffizienten hergeleitet werden. Dazu vergleichen wir die Taylorreihen

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\pm}(\lambda) &= \pm \mathcal{S}_{\pm}(-\lambda + i\mathcal{A}) \rightsquigarrow \\ \sum_k \frac{(i\lambda)^k \mathcal{A}^l}{k!l!} L_{l,\pm}^k &= \pm \sum_k \frac{(-i\lambda - \mathcal{A})^k \mathcal{A}^l}{k!l!} L_{l,\pm}^k \end{aligned} \quad (5.86)$$

⁶ K. Saito, Y. Utsumi, Phys. Rev. B **78**, 115429 (2008).

Term für Term. Für die Ordnung $O(\lambda\mathcal{A})$ haben wir auf der linken Seite beispielsweise von $k = 1, l = 1$ den Term $(i\lambda)\mathcal{A}L_{1,\pm}^1$, während auf der rechten Seite

$$\pm \left[(-i\lambda - \mathcal{A})\mathcal{A}L_{1,\pm}^1 + \frac{1}{2!}(-\lambda^2 + 2i\lambda\mathcal{A} + \mathcal{A}^2)L_{2,\pm}^0 \right] \quad (5.87)$$

steht. Dieser Vergleich liefert also

$$L_{1,\pm}^1 = \pm [-L_{1,\pm}^1 + L_{0,\pm}^2], \quad (5.88)$$

was sofort auf

$$L_{0,-}^2 = 0, \quad 2L_{1,+}^1 = L_{0,+}^2 \quad (5.89)$$

führt. Die erste dieser Relationen besagt

$$L_0^2 = L_0^2(R), \quad \text{Symmetrie der Gleichgewichtsfluktuationen.} \quad (5.90)$$

Der Koeffizient $L_0^2 \equiv \langle\langle I^2 \rangle\rangle_{\beta V=0}$ beschreibt ja nichts anderes als die *thermischen Fluktuationen*, also die Gleichgewichtsfluktuationen des Stroms bei Spannung $V = 0$. Diese Fluktuationen sind also z.B. symmetrisch bei Umkehrung eines äußeren Magnetfeldes $B \rightarrow -B$.

Als nächstes betrachten wir die Ordnung $O(\lambda^0\mathcal{A}^2)$, also $k = 0, l = 2$ mit dem Term $L_{2,\pm}^2$ auf der linken Seite. Vergleich mit der rechten Seite ergibt

$$\frac{1}{2!}L_{2,\pm}^0 = \pm \left[\frac{1}{2!}L_{2,\pm}^0 - L_{1,\pm}^1 + \frac{1}{2!}L_{0,\pm}^2 \right]. \quad (5.91)$$

Allerdings ist für alle l

$$L_{l,\pm}^0, \quad \text{wegen } \mathcal{S}_{\pm}(\lambda = 0) = 0 \quad (5.92)$$

wegen $\mathcal{S}(\lambda) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \sum_n P(n, t) e^{i\lambda n}$ und der Normierung der Verteilung $P(n, t)$. Mit $L_{0,-}^2$ haben wir dann also

$$L_{1,-}^1 = 0, \quad \text{Onsager-Casimir-Beziehung.} \quad (5.93)$$

Diese sehr knappe Formel ist tatsächlich eine Beziehung zwischen Transportkoeffizienten. Wenn wir z.B. ein Magnetfeld B explizit indizieren, lautet sie

$$L_1^1(B) = L_1^1(-B), \quad (5.94)$$

d.h. bei der Zwei-Terminal-Messung sind die linearen Transportkoeffizienten symmetrisch mit dem Magnetfeld B .

Schließlich können wir $L_{1,-}^1 = 0$ und $L_{0,-}^2 = 0$ mit $2L_{1,+}^1 = L_{0,+}^2$ kombinieren, was auf

$$L_1^1 = \frac{1}{2}L_0^2, \quad \text{Fluktuations-Dissipationstheorem} \quad (5.95)$$

führt: der *lineare* Transportkoeffizient L_1^1 läßt sich durch die Gleichgewichtsfuktuationen L_0^2 ausdrücken.

Die große Stärke des Fluktuationstheorems in seiner Form Gl. (5.81), $\mathcal{S}(\lambda) = \mathcal{S}_R(-\lambda + i\mathcal{A})$, besteht nun in der Möglichkeit, auch für höhere Transportkoeffizienten exakte Relationen herzuleiten, die dann experimentell getestet werden können, und zwar einfach durch Vergleich der höheren Terme der Taylorentwicklung Gl. (5.86). Saito und Utsumi geben z.B.

$$L_{2,-}^1 = \frac{1}{3}L_{1,-}^2 = \frac{1}{6}L_{0,-}^3, \quad (5.96)$$

und weitere ähnliche Relationen an.

5.4.2 Gekoppelte Transportprozesse

Wir betrachten eine Situation mit Zählfeldern λ_1 und λ_2 für zwei Transportprozessen mit zwei Strömen I_1 und I_2 , z.B. zwei unabhängigen Teilchenströmen, die an zwei Terminals einer Multiterminal-Geometrie gemessen werden, oder einem Teilchen- und einem Wärmestrom. Die CGF hängt jetzt von den zwei Zählfeldern λ_1 und λ_2 ab, und die entsprechend (anti)-symmetrisierten CGF erfüllen ganz analog zu oben ⁷

$$\mathcal{S}_{\pm}(\lambda_1, \lambda_2) = \pm \mathcal{S}_{\pm}(-\lambda_1 + i\mathcal{A}_1, -\lambda_2 + i\mathcal{A}_2). \quad (5.97)$$

Wieder analog zu oben vergleichen wir die entsprechenden Taylorentwicklungen der Transportkoeffizienten

$$L_{l_1 l_2; (R)}^{k_1 k_2} \equiv \frac{\partial^{l_1 + l_2} \langle \langle I_1^{k_1} I_2^{k_2} \rangle \rangle_{(R)}}{\partial \mathcal{A}_1^{l_1} \partial \mathcal{A}_2^{l_2}}. \quad (5.98)$$

Wir haben

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 k_2 l_1 l_2} \frac{1}{k_1! k_2! l_1! l_2!} L_{l_1 l_2, \pm}^{k_1 k_2} (i\lambda_1)^{k_1} (i\lambda_2)^{k_2} \mathcal{A}_1^{l_1} \mathcal{A}_2^{l_2} \\ &= \pm \sum_{k_1 k_2 l_1 l_2} \frac{1}{k_1! k_2! l_1! l_2!} L_{l_1 l_2, \pm}^{k_1 k_2} (-i\lambda_1 - \mathcal{A}_1)^{k_1} (-i\lambda_2 - \mathcal{A}_2)^{k_2} \mathcal{A}_1^{l_1} \mathcal{A}_2^{l_2}. \end{aligned} \quad (5.99)$$

Durch Vergleich der $O(\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2)$ sowie der $O(\lambda_1 \mathcal{A}_2)$ haben wir

$$(0 =) L_{11\pm}^{00} = \pm (L_{00\pm}^{11} - L_{01\pm}^{10} - L_{10\pm}^{01}) \quad (5.100)$$

$$L_{01\pm}^{10} = \pm (-L_{01\pm}^{10} + L_{00\pm}^{11}) \rightsquigarrow L_{00-}^{11} = 0, \quad L_{00+}^{11} = 2L_{01+}^{10}, \quad (5.101)$$

⁷ K. Saito, Y. Utsumi, Phys. Rev. B **78**, 115429 (2008).

was in der ersten der Gleichungen zu

$$L_{01-}^{10} = -L_{10-}^{01}, \quad L_{01+}^{10} = L_{10+}^{01} \quad (5.102)$$

und damit durch Addition zur kreuzweisen Relation der ersten Kumulanten, d.h. der Ströme

$$L_{01}^{10}(B) \equiv \frac{\partial \langle I_1 \rangle_B}{\partial \mathcal{A}_2} = \frac{\partial \langle I_2 \rangle_{-B}}{\partial \mathcal{A}_1} \equiv L_{10}^{01}(-B), \quad \text{Onsager-Casimir-Relation.} \quad (5.103)$$

führt. Hier haben wir wieder explizit das Magnetfeld B bzw. $-B$ angezeigt.

Entsprechend der Diskussion oben können auch in diesem Fall wieder höhere Relationen abgeleitet werden, vgl. die Arbeit von SAITO/UTSUMI. Wir diskutieren die physikalische Bedeutung solcher kreuzweisen Relationen in den nächsten Abschnitten:

5.4.3 Korrelationsfunktionen

Die mikroskopische Zeitumkehrinvarianz führt auch bei den Korrelationsfunktionen in der Theorie der Linearen Antwort zu Symmetrien z.B. für den Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$, Gl. (2.100).

Wir betrachten nochmals den Zeitumkehroperator θ ,

$$\theta(\lambda|\Psi\rangle + \mu|\Phi\rangle) = \lambda^*\theta|\Psi\rangle + \mu^*\theta|\Phi\rangle, \quad (\phi, \psi) = (\theta\psi, \theta\phi), \quad (5.104)$$

wo wir jetzt das Skalarprodukt (\cdot, \cdot) im Hilbertraum explizit ausgeschrieben haben. Wir definieren den adjungierten θ^\dagger über

$$(\phi, \theta^\dagger\psi) = (\theta\phi, \psi)^* = (\psi, \theta\phi), \quad (5.105)$$

was konsistent ist mit

$$(\phi, \psi) = (\theta\psi, \theta\phi) = (\phi, \theta^\dagger\theta\psi) = (\phi, \psi) \quad (5.106)$$

unter der Bedingung

$$\theta\theta^\dagger = \theta^\dagger\theta = 1. \quad (5.107)$$

Im Folgenden benötigen wir die Spurbildung, für die gilt

$$\text{Tr}A = \text{Tr}\theta A^\dagger \theta^\dagger. \quad (5.108)$$

Das sehen wir durch

$$\text{Tr}A = \sum_n (\phi_n, A\phi_n) = \sum_n (\theta^\dagger\theta A^\dagger\theta^\dagger\theta\phi_n, \phi_n) = \sum_n (\theta\phi_n, \theta A^\dagger\theta^\dagger\theta\phi_n), \quad (5.109)$$

da mit ϕ_n auch $\theta\phi_n$ eine Basis ist.

Wir betrachten jetzt Korrelationsfunktionen im Gleichgewicht vom Typ

$$C_{AB}(t) \equiv \langle A(t)B \rangle \equiv \text{Tr} \rho(H) e^{iHt} A e^{-iHt} B = \langle AB(-t) \rangle. \quad (5.110)$$

Im letzten Schritt haben wir hier schon ausgenutzt, dass im Gleichgewicht die Dichtematrix $\rho(H)$ mit der Zeitentwicklung $e^{\pm iHt}$ vertauscht. Jetzt benutzen wir Gl. (5.108) und finden (beachte $H = H^\dagger$)

$$\begin{aligned} C_{AB}(t) &= \text{Tr} \theta B^\dagger e^{iHt} A^\dagger e^{-iHt} \rho(H) \theta^\dagger = \text{Tr} B_\theta^\dagger e^{-iH_\theta t} A_\theta^\dagger e^{iH_\theta t} \rho(H_\theta) \\ &= \langle B_\theta^\dagger A_\theta^\dagger(-t) \rangle = \langle B_\theta^\dagger(t) A_\theta^\dagger \rangle, \end{aligned} \quad (5.111)$$

also die Symmetrie

$$C_{AB}(t) = C_{B_\theta^\dagger A_\theta^\dagger}(t). \quad (5.112)$$

Die Spur wird hierbei in $C_{B_\theta^\dagger A_\theta^\dagger}(t)$ mit der Dichtematrix $\rho(H_\theta)$ berechnet, wobei die neuen Operatoren

$$H_\theta \equiv \theta H \theta^\dagger, \quad A_\theta \equiv \theta A \theta^\dagger, \quad B_\theta \equiv \theta B \theta^\dagger \quad (5.113)$$

definiert wurden.⁸ Die Symmetrie Gl. (5.112) überträgt sich auf alle anderen Response-Funktionen der Lineare-Antwort-Theorie. Insbesondere auch auf die Response-Funktion Gl. (2.93) des paramagnetischen Stroms in der Kubo-Formel,

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \equiv i\theta(t) \text{Tr} \left(\rho_0 [\tilde{j}_\alpha^p(\mathbf{r}, t), j_\beta^p(\mathbf{r}')] \right). \quad (5.114)$$

Der paramagnetische Stromoperator Gl. (2.87)

$$\hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \equiv \sum_l \frac{q_l}{2m_l} [\mathbf{p}_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \mathbf{p}_l] \quad (5.115)$$

ist hier zwar ungerade bei Zeitumkehr,

$$\theta \hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}) \theta^\dagger = -\hat{\mathbf{j}}^p(\mathbf{r}). \quad (5.116)$$

In der Response-Funktion $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$ tritt er aber quadratisch auf und das Minuszeichen kürzt sich weg. Wir können also Gl. (5.112) mit $A = j_\alpha^p(\mathbf{r})$, $B = j_\beta^p(\mathbf{r}')$ verwenden und erhalten

$$\chi_{\alpha\beta}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \chi_{\beta\alpha}^{-B}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; t), \quad \text{Onsager-Casimir Symmetrie.} \quad (5.117)$$

⁸ In unserer Herleitung des Fluktuationstheorems oben hatten wir etwas salopp nicht zwischen θ und θ^\dagger unterschieden.

Hierbei haben wir das *Magnetfeld* B explizit als Index angegeben, um die Umkehrung $B \rightarrow -B$ unter der Operation $H \rightarrow H_\theta$ anzuzeigen. Mit Hilfe des Gesamtausdrucks für den Leitfähigkeitstensor Gl. (2.100),

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \equiv \frac{\tilde{\chi}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) - \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{s=1}^{N_s} \frac{q_s^2}{m_s} n_s}{i\omega}, \quad (5.118)$$

lautet die Onsager-Casimir Symmetrie

$$\sigma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \sigma_{\beta\alpha}^{-B}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \omega). \quad (5.119)$$

5.5 Thermische Transporteffekte

Besonders nützlich ist das Austausch-Fluktuationstheorem Gl. (5.55)

$$\frac{p(\{\Delta E_\alpha, \Delta n_\alpha\})}{p_R(\{-\Delta E_\alpha, -\Delta n_\alpha\})} = \prod_{\alpha} e^{\beta_\alpha (\Delta E_\alpha - \mu_\alpha \Delta n_\alpha)}, \quad (5.120)$$

wenn thermische Transporteffekte betrachtet werden, z.B. der durch eine Temperaturdifferenz erzeugte Wärmestrom zwischen zwei oder mehreren räumlichen Gebieten. Wenn wir z.B. nur Energie-, aber keinen Teilchenaustausch zwischen zwei Reservoiren L und R haben, ist im Langzeitlimes

$$-\Delta E_L = \Delta E_R \equiv E \quad (5.121)$$

und damit ⁹

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P(E, t)}{P(-E, t)} = e^{(-\beta_L - \beta_R)E}. \quad (5.122)$$

Grundsätzlich sind thermische Transporteffekte qualitativ von elektromechanischen Transporteffekten zu unterscheiden. Letztere werden durch Kräfte und elektromagnetische Felder hervorgerufen, für die sich Potentiale und damit entsprechende mikroskopische (Stör)-Hamiltonians formulieren lassen. Die Reaktion auf eine Änderung einer Temperatur z.B. im Sinne der Theorie der Linearen Antwort hingegen hat das Problem, dass die Temperatur keine mikroskopische Größe ist und somit eine Temperaturänderung nicht ohne Weiteres als ein ‘Stör-Hamiltonian’ formuliert werden kann.

Ein üblicher Ausweg ist die Einführung verschiedener räumlicher Gebiete, die jeweils lokal im thermischen Gleichgewicht bei einer bestimmten Temperatur sind. Dann wird z.B. analog zur Landauer-Büttiker Theorie oder mit Hilfe von Mastergleichungen ein Energiestrom zwischen diesen räumlichen Gebieten berechnet.

⁹ Jarzynski, Wójcik (2004).

5.5.1 Affinität und Fluß

(CALLEN) Wir betrachten einen isolierten Behälter, in dem Energie durch eine feste Trennwand zwischen zwei Raumgebieten G und G' fließen kann. Die Gesamtenergie ist konstant,

$$U + U' = U^0, \quad \text{konstant,} \quad (5.123)$$

wobei U (U') die Energie in G (G') ist. Wir betrachten die Gesamtentropie $S_{\text{tot}} \equiv S + S'$ des Behälters als Funktion von U . Im Gleichgewicht ist sie maximal bezüglich Variationen von U , d.h.

$$0 = \mathcal{F}_U \equiv \left(\frac{\partial S_{\text{tot}}}{\partial U} \right)_{U^0} = \frac{\partial S}{\partial U} - \frac{\partial S'}{\partial U'} \equiv F_U - F'_U. \quad (5.124)$$

Das definiert im Gleichgewicht die Temperatur

$$\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{\partial S'}{\partial U'} = \frac{1}{T}. \quad (5.125)$$

Ist das Gleichgewicht noch nicht erreicht, $\mathcal{F}_U \neq 0$, so stellt die Differenz

$$\mathcal{F}_U = \frac{1}{T} - \frac{1}{T'}, \quad \text{Affinität} \quad (5.126)$$

eine *verallgemeinerte 'Kraft'* dar, die das System ins Gleichgewicht treibt: Die Energie U ändert sich mit der Zeit, d.h. der Energiestrom

$$J_U \equiv \frac{dU}{dt}, \quad \text{Energiestrom} \quad (5.127)$$

ist von Null verschieden.

Jetzt lassen wir auch weitere Variablen des Gebietes G in der Gesamtentropie zu,

$$S_{\text{tot}} = S_{\text{tot}}(X_0, X_1, \dots), \quad X_0 \equiv U, \quad (5.128)$$

z.B. die Teilchenzahlen $X_1 = N_1$ etc verschiedener Teilchensorten, für die die Trennwand durchlässig ist, aber wir halten das Volumen V_{tot} des Behälters fest. Dann ändert sich die Gesamtentropie mit der Zeit gemäß

$$\frac{dS_{\text{tot}}}{dt} = \sum_k \frac{\partial S_{\text{tot}}}{\partial X_k} \frac{dX_k}{dt} \equiv \sum_k \mathcal{F}_k J_k, \quad \text{Affinität } \mathcal{F}_k, \text{ Strom ('Fluß')} J_k. \quad (5.129)$$

5.5.2 Kontinuierliche Beschreibung

Statt zweier Raumgebiete mit jeweils homogenen Entropien $S(U, V, N, \dots)$, $S'(U', V', N', \dots)$ betrachten wir jetzt viele sehr kleine Raumelemente mit Volumen $V \rightarrow 0$ und Entropie $S \rightarrow 0$, so dass

$$s(u, n, \dots) \equiv \lim_{V \rightarrow 0, S \rightarrow 0} \frac{S(U, V, N, \dots)}{V}, \quad \text{Entropie pro Volumen} \quad (5.130)$$

endlich bleibt. Die Entropiedichte s wird jetzt als die aus der Gleichgewichtstheorie bekannte Funktion angesetzt, aber ihre Variablen u (Energiedichte), n (Teilchendichte) etc. werden jetzt orts- und zeitabhängig angesetzt, d.h.

$$s = s(u(\mathbf{r}, t), n(\mathbf{r}, t), \dots) \quad (5.131)$$

Gl. (5.131) stellt den Übergang von der Gleichgewichts- zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik dar. Hierbei wird vorausgesetzt, dass für das betrachtete Materialsystem der funktionale Zusammenhang $S = S(U, V, N)$ aus der Gleichgewichtsthermodynamik bekannt ist. Zum Beispiel ist für ein ideales klassisches Gas in d Dimensionen

$$\begin{aligned} S(U, V, N) &= k_B N \left[\ln \frac{V}{\lambda^d} - \ln N + \frac{d+2}{2} \right] = \\ &= k_B N \left[\ln \frac{V}{N} \left(\frac{2mU}{2\pi\hbar^2 dN} \right)^{d/2} + \frac{d+2}{2} \right], \quad \text{Sackur-Tetrode-Gleichung.} \end{aligned} \quad (5.132)$$

Die Sackur-Tetrode-Gleichung liefert die korrekte Homogenitätsrelation für die Entropie als Funktion der extensiven Variablen (U, V, N) , d.h.

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N) \quad (5.133)$$

wie in der phänomenologischen Thermodynamik gefordert, vgl. SKRIPT THERMODYNAMIK.

Das Differential von s , Gl. (5.131), lautet nun

$$ds = F_0 du + F_1 dn, \quad F_1 \equiv \frac{\partial s}{\partial u} = \frac{1}{T(\mathbf{r}, t)}, \quad F_2 \equiv \frac{\partial s}{\partial n} = -\frac{\mu(\mathbf{r}, t)}{T(\mathbf{r}, t)} \quad (5.134)$$

mit den orts- und zeitabhängigen Temperaturen $T(\mathbf{r}, t)$ und chemischen Potentialen $\mu(\mathbf{r}, t)$ (der Einfachheit halber betrachten wir nur ein Einkomponentensystem).

Wir wollen nun eine Beziehung analog zu Gl. (5.129) herleiten und die Affinitäten \mathcal{F} , die zu den Flüssen (Energie-Stromdichte \mathbf{j}_U und Teilchen-Stromdichte \mathbf{j}_N) gehören, für den kontinuierlichen Fall bestimmen. Im 'diskreten' Fall (zwei Raumgebiete) war z.B. die zu U zugehörige Affinität ja $\mathcal{F}_U = \frac{1}{T} - \frac{1}{T'}$, Gl. (5.126), und es ist nicht von vorneherein klar, wie der Grenzübergang zur kontinuierlichen Beschreibung zu erfolgen hat.

Die zeitliche Änderung der Gesamtentropie in einem Volumen V ist in der kontinuierlichen Beschreibung gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{dS_{\text{tot}}}{dt} &= \int_V d\mathbf{r} \frac{ds}{dt} = \int_V d\mathbf{r} \left(\frac{\partial s}{\partial u} \dot{u} + \frac{\partial s}{\partial n} \dot{n} \right) = - \int_V d\mathbf{r} \left(\frac{\partial s}{\partial u} \text{div} \mathbf{j}_U + \frac{\partial s}{\partial n} \text{div} \mathbf{j}_N \right) \\ &= \int_V d\mathbf{r} \left(\left(\text{grad} \frac{\partial s}{\partial u} \right) \mathbf{j}_U + \left(\text{grad} \frac{\partial s}{\partial n} \right) \mathbf{j}_N \right), \end{aligned} \quad (5.135)$$

wobei wir die Kontinuitätsgleichungen für die Teilchenzahl- und Energiedichte

$$\dot{n} + \text{div} \mathbf{j}_N = 0, \quad \dot{u} + \text{div} \mathbf{j}_U = 0 \quad (5.136)$$

sowie ‘partielle Integration’ benutzt haben (Randterme verschwinden). Der Integrand ist gibt also gerade die *lokale Entropieproduktionsrate in der Form ‘Affinität-versus-Fluß (Stromdichten)’*,

$$\frac{ds}{dt} = \mathcal{F}_U \mathbf{j}_U - \mathcal{F}_N \mathbf{j}_N \quad (5.137)$$

$$\mathcal{F}_U \equiv \text{grad} \frac{\partial s}{\partial u} = \text{grad} \frac{1}{T}, \quad \mathcal{F}_N \equiv -\text{grad} \frac{\partial s}{\partial n} = \text{grad} \frac{\mu}{T}. \quad (5.138)$$

(Das Vorzeichen in $-\mathcal{F}_N \mathbf{j}_N$ ist Konvention). Die so bestimmten Affinitäten sind zumindest konsistent mit der Grundannahme Gl. (5.131) einer lokalen Gleichgewichtsform der Entropiedichte. Alternativ zur obigen Herleitung kann man auch das ‘Kastenmodell’ für mehrere Gebiete G, G', G'' etc. mit Strömen zwischen den verschiedenen Gebieten erweitern und kommt wieder auf dieselbe Form, d.h. Produkte von Gradienten der lokalen Entropieableitungen mit den zugehörigen Stromdichten.

5.5.3 Linearisierung und Wärmestrom

(CALLEN) Die weitere phänomenologische Beschreibung macht jetzt einen linearen Ansatz für den Zusammenhang zwischen den Stromdichten und den Affinitäten;

$$-\mathbf{j}_N = L_{NN} \mathcal{F}_N + L_{NU} \mathcal{F}_U \quad (5.139)$$

$$\mathbf{j}_U = L_{UN} \mathcal{F}_N + L_{UU} \mathcal{F}_U. \quad (5.140)$$

Die Koeffizienten L_{NN} etc. sind hier zunächst Matrizen, wir betrachten aber gleich eine eindimensionale einfachere Version. Zunächst definieren wir, motiviert durch die thermodynamische Grundgleichung $Tds = du - \mu dn$

$$\mathbf{j}_Q \equiv \mathbf{j}_U - \mu \mathbf{j}_N, \quad \text{Wärmestromdichte} . \quad (5.141)$$

Anschaulich entspricht das der Differenz ‘Gesamtenergie - potentielle Energie’. Einsetzen in Gl. (5.137) liefert die neue Beziehung

$$\frac{ds}{dt} = \left(\text{grad} \frac{1}{T} \right) \mathbf{j}_Q - \left(\frac{1}{T} \text{grad} \mu \right) \mathbf{j}_N, \quad (5.142)$$

also statt der Affinität $\text{grad} \frac{\mu}{T}$ die neue, vielleicht praktischere Affinität $\frac{1}{T} \text{grad} \mu$.¹⁰ Für eine eindimensionale Situation lautet der lineare Ansatz dann

$$-j_N = L_{11} \frac{1}{T} \text{grad} \mu + L_{12} \text{grad} \frac{1}{T} \quad (5.143)$$

$$j_Q = L_{12} \frac{1}{T} \text{grad} \mu + L_{22} \text{grad} \frac{1}{T} \quad (5.144)$$

¹⁰ Das zeigt schon, dass die Zerlegung $\dot{s} = \sum_k \mathcal{F}_k j_k$ nicht eindeutig ist.

mit Onsager-Relationen

$$L_{12}(B) = L_{21}(-B). \quad (5.145)$$

Wir können alternativ auch $\mathbf{j}_Q \equiv \mathbf{j}_U - \mu \mathbf{j}_N$ in die eindimensionale Version von Gl. (5.139) einsetzen und erhalten Gl. (5.143) mit der korrekten Onsager-Relation (NACHRECHNEN).

5.5.4 Transportkoeffizienten

(CALLEN) Wir betrachten eine Stromdichte von einzelnen Ladungen e und eine Wärmestromdichte in x -Richtung in einer Situation ohne Magnetfeld. Wegen der Onsager-Relation $L_{12} = L_{21}$ gibt es dann also *drei* unabhängige Transportkoeffizienten (als Funktionen von \mathbf{r}, t).

Wir schreiben das elektrochemische Potential (x -Abhängigkeit in der Notation hier immer weggelassen)

$$\mu = \mu_e + \mu_c, \quad \mu_e \equiv e\phi \quad (5.146)$$

mit dem üblichen elektrostatischen Potential ϕ . Der Ausdruck $(-1/e)\nabla\mu_e$ ist das elektro(statische) Feld und $\nabla\mu_c$ ist eine durch ein Konzentrationsgefälle verursachte Kraft.

Die elektrischen und Wärme-Leitfähigkeiten werden nun definiert und über die Koeffizienten L_{ij} oben ausgedrückt;

$$ej_N|_{\nabla T=0} \equiv -\sigma \frac{1}{e} \nabla\mu \rightsquigarrow \sigma = \frac{e^2 L_{11}}{T}, \quad \text{elektrische Leitfähigkeit} \quad (5.147)$$

$$-j_Q|_{j_N=0} \equiv \kappa \nabla T, \quad \kappa = \frac{L_{11}L_{22} - L_{12}^2}{T^2 L_{11}}, \quad \text{Wärmeleitfähigkeit.} \quad (5.148)$$

Im Vergleich mit dem allgemeinen Ansatz der linear-response-Theorie

$$j(x, t) = \int dt' \int dx' \sigma(x, x'; t, t') E(x', t') \quad (5.149)$$

wäre hier also z.B. die Leitfähigkeit $\sigma(x, x'; t, t') \propto \delta(x - x')\delta(t - t')$ räumlich und zeitlich lokal.

Der dritte unabhängige Koeffizient wird über die Bedingung $j_N = 0$ (kein Teilchenstrom) und die daraus resultierende Gleichung

$$-\frac{1}{e} \nabla\mu = \varepsilon \nabla T, \quad \varepsilon \equiv -\frac{L_{12}}{eL_{11}T}, \quad \text{Thermokraft} \quad (5.150)$$

definiert. Deren Bedeutung diskutieren wir gleich unten beim Seebeck-Effekt.

Für die *Entropiestromdichte* $j_S \equiv \frac{1}{T} j_Q$ erhalten wir (NACHRECHNEN)

$$j_S \equiv \frac{1}{T} j_Q = \varepsilon e j_N + T \kappa \nabla \frac{1}{T}. \quad (5.151)$$

Der erste Beitrag kommt vom elektrischen Strom, der zweite vom Wärmestrom. Die Thermokraft ist also die vom elektrischen Strom transportierte Entropie pro Ladung e .

Wir diskutieren nun einige thermoelektrische Effekte.

5.5.5 Isotherme Diffusion

Wir betrachten die Teilchenstromdichte j_N in einem System bei konstanter Temperatur T (d.h. $\nabla T = 0$),

$$-j_N = L_{11} \frac{1}{T} \nabla \mu \quad (5.152)$$

und bei verschwindendem elektrostatischen Potential ϕ , d.h. nach Gl. (5.146) $\mu = \mu_c$. Wir nehmen das chemische Potential μ_c nur als Funktion der Teilchenzahldichte n und Temperatur an, dann gilt im isothermen Fall mit $\nabla \mu = \left(\frac{\partial \mu_c}{\partial n} \right)_T \nabla n$

$$-j_N = D \nabla n, \quad D \equiv \frac{L_{11}}{T} \left(\frac{\partial \mu_c}{\partial n} \right)_T, \quad \text{1. Ficksches Gesetz} \quad (5.153)$$

und zusammen mit der Kontinuitätsgleichung $\nabla j_N = \dot{n}$ erhalten wir

$$\dot{n} = D \Delta n, \quad \text{Diffusionsgleichung.} \quad (5.154)$$

Sie beschreibt den Anteil der Teilchenstromdichte j_N (Diffusionsstrom), der von Änderungen des chemischen Potentials (wegen $\mu_c = \mu_c(n)$ also Dichteänderungen) bestimmt wird und der also insbesondere auch bei ungeladenen Teilchen auftritt.

Mit $\sigma = \frac{e^2 L_{11}}{T}$, Gl. (5.147), haben wir für geladene Teilchen die Beziehung

$$\sigma = e^2 D \left(\frac{\partial \mu_c}{\partial n} \right)_T^{-1} \quad (5.155)$$

zwischen Leitfähigkeit und Diffusionskonstante.

5.5.6 Peltier-Effekt ('Lötstelle')

Durch zwei homogene Leiter A und B fließe eine konstante Stromdichte $e j_N$. Damit beide Leiter im thermischen Gleichgewicht mit einem Reservoir der Temperatur T sind (d.h. $\nabla T = 0$ in den Leitern), muss sich wegen Gl. (5.151) mit $j_Q = \varepsilon T e j_N$ der Wärmestrom beim Übergang von A nach B (an der 'Lötstelle') ändern, und zwar mit

$$\delta j_Q = (\delta \varepsilon) T e j_N. \quad (5.156)$$

Der Wärmestrom δj_Q ist *linear in j_N* , im Gegensatz zur Jouleschen Wärme, die quadratisch in j_N^2 ist. Er muss von aussen zu/abgeführt werden (SKIZZE) und lässt sich beschreiben durch einen Koeffizienten;

$$\Pi \equiv \frac{\delta j_Q}{e j_N} = T \delta \varepsilon, \quad \text{Peltier-Koeffizient, zweite Kelvin-Beziehung.} \quad (5.157)$$

5.5.7 Seebeck-Effekt ('Thermoelement')

Wir betrachten einen an einer Stelle aufgeschnittenen Ring, in dem also kein Teilchenstrom entlang des Rings fließen kann $j_N = 0$ und damit

$$\nabla \mu(\mathbf{r}) = -e \varepsilon(\mathbf{r}) \nabla T(\mathbf{r}), \quad (5.158)$$

vgl. Gl. (5.150). Wir integrieren das einmal um den Ring;

$$V_{\text{thermo}} \equiv -\frac{1}{e} \oint d\mathbf{r} \nabla \mu(\mathbf{r}) = \oint \varepsilon(\mathbf{r}) \nabla T(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad \text{Thermospannung.} \quad (5.159)$$

Für zwei Halbringe A, B mit der geschlossenen Kontaktstelle auf Temperatur T_1 und der offenen Kontaktstelle auf Temperatur T_2 (SKIZZE) wird die Thermospannung zu

$$V_{\text{thermo}} = \int_{T_1}^{T_2} \varepsilon_A dT + \int_{T_2}^{T_1} \varepsilon_B dT = (\varepsilon_A - \varepsilon_B)(T_2 - T_1) \quad (5.160)$$

für in den Halbringen konstante Thermokraft $\varepsilon_{A,B}$. Die Thermospannung ist eine *elektromotorische Kraft* und ein Beispiel für eine elektro-/magnetostatische Situation mit einem Feld \mathbf{E} und

$$\oint d\mathbf{r} \mathbf{E} \neq 0, \quad (5.161)$$

vgl. SKRIPT ELEKTRODYNAMIK.

5.5.8 Thomson-Effekt ('kontinuierlicher Peltier-Effekt')

Wir gehen aus von $j_U = j_Q + \mu j_N$ ('1. Hauptsatz') und der Kontinuitätsgleichung für die Energiedichte u ,

$$-\dot{u} = \nabla j_U = \nabla j_Q + (\nabla \mu) j_N, \quad (5.162)$$

wobei wir einen konstanten Teilchenstrom mit $\nabla j_N = 0$ voraussetzen. Einsetzen von $j_Q = T \varepsilon e j_N + T^2 \kappa \nabla \frac{1}{T}$, Gl. (5.151), liefert

$$-\dot{u} = \nabla j_U = T(\nabla \varepsilon)(e j_N) - \nabla(\kappa \nabla T) - \frac{e^2}{\sigma} j_N^2. \quad (5.163)$$

Für konstante Temperatur $\nabla T = 0$ ist der letzte Term $\frac{e^2}{\sigma} j_N^2$ gerade die vom elektrischen Strom erzeugte *Joulesche Wärme*. Der erste Term ist dann gerade die Peltier-Wärme, die dann für inhomogene Thermokraft ε auftritt.

Im eigentlichen Thomson-Effekt wird das Temperaturprofil $T(x)$ jetzt mittels idealisierter kontinuierlicher Wärmebäder entlang des Leiters fest eingestellt, und zwar identisch zur Situation ohne Strom ($j_N = 0$) und ohne Wärmebäder (adiabatisch isoliert), wo also keine zusätzliche Wärme produziert wird ($\text{div} j_Q = 0$) und wegen $\nabla j_U = \nabla j_Q + (\nabla \mu) j_N$ deshalb $\nabla j_U = 0$ gilt. Dieses Wärmeprofil erfüllt natürlich auch Gl. (5.163), also gerade

$$\nabla(\kappa \nabla T) = 0. \quad (5.164)$$

Diese Gleichung muss dann aber auch bei Anwesenheit der Wärmebäder gelten, da das Temperaturprofil $T(x)$ das gleiche ist.¹¹ Im Thomson-Effekt gibt es also tatsächlich per Konstruktion neben der Joule-Wärme nur die verallgemeinerte Peltierwärme

$$T(\nabla \varepsilon)(e j_N) = T \frac{d\varepsilon}{dT}(\nabla T)(e j_N), \quad \text{Thomson-Wärme} . \quad (5.165)$$

Hier wurde eine Temperatur-abhängige Thermokraft angesetzt. Mit

$$\tau \equiv T \frac{d\varepsilon}{dT}, \quad \text{Thomson-Koeffizient} , \quad (5.166)$$

und $\Pi_{AB} \equiv T(\varepsilon_A - \varepsilon_B)$, Gl. (5.157), gilt dann für einen Kontakt zwischen zwei Materialien A und B

$$\frac{d\Pi_{AB}}{dT} = \tau_A + \varepsilon_A - \tau_B - \varepsilon_B, \quad \text{erste Kelvin-Relation.} \quad (5.167)$$

¹¹ Hier braucht man wahrscheinlich noch ein weiteres Eindeutigkeitsargument für die verallgemeinerte Laplacegleichung Gl. (5.164).

6. QUANTENPHASENÜBERGÄNGE IM NICHTGLEICHGEWICHT

6.1 Einleitung

Der abrupte Übergang zwischen stark unterschiedlichen Phasen eines Systems bei Änderung von Parametern wird als Phasenübergang bezeichnet. Im *Gleichgewicht* erscheinen dann im Fall *klassischer Phasenübergänge* Nichtanalytizitäten in einem thermodynamischen Potential wie z.B. der Freien Energie $F = U - TS$. Im *Phasendiagramm* spielt dann die Temperatur T eine wichtige Rolle: der Übergang erfolgt bei einer kritischen Temperatur T_c , in deren Nähe thermische Fluktuationen eine große Rolle spielen. Man sagt dann häufig, dass die thermischen Fluktuationen den Phasenübergang ‘treiben’.

Im Gegensatz hierzu findet ein *Quantenphasenübergang* bei Temperatur $T = 0$ statt. Bei ihm wird durch Änderung eines Systemparameters (Kontroll-Parameter) im Hamiltonian der Übergang zwischen den Quanten-Phasen des Systems induziert, die qualitativ unterschiedlichen Grundzustandswellenfunktionen entsprechen. In Analogie zum klassischen Phasenübergang findet man Nichtanalytizitäten in der Grundzustandsenergie als Funktion des Kontroll-Parameters. Quantenphasenübergänge werden neuerdings auch für angeregte Zustände untersucht (‘excited state quantum phase transitions’), hier spielt dann manchmal das Verhalten der Zustandsdichte eine wichtige Rolle.

Eine quantitative Beschreibung von Phasenübergängen im Gleichgewicht erfolgt mit Hilfe von *Ordnungsparametern* und *kritischen Exponenten* (SKRIPT THERMODYNAMIK). Konzepte wie *spontane Symmetriebrechung* und der thermodynamische Limes spielen eine wichtige Rolle.

Für diese Vorlesung am wichtigsten sind die *Phasenübergänge im Nichtgleichgewicht*, also z.B. offene Systeme mit Ein- und Austritt von Teilchen und Energie oder getriebene Systemen mit zeitabhängigen Feldern. Ein Beispiel hierfür ist der *Laser*. Wieder kann man formal je nach Art der Beschreibung zwischen klassischen und quantenmechanischen Nichtgleichgewicht-Phasenübergängen unterscheiden. Das Beispiel des Lasers, wo sowohl klassischen als auch quantenmechanische Aspekte eine Rolle spielen, zeigt jedoch bereits, dass eine solche Trennung wahrscheinlich nur bedingt sinnvoll ist.

Im Folgenden schieben wir die zwei Beispiel-Modelle zu Quantenphasenübergängen aus QM II (SKRIPT) der Vollständigkeit halber ein.

6.2 Das Quanten-Ising-Modell ($d = 1$) im Gleichgewicht

Das Quanten-Ising-Modell ist ein Spezialfall des anisotropen Heisenberg-Hamiltonians für $S = \frac{1}{2}$ mit Spin-Spin-Kopplung nur zwischen den z -Komponenten;

$$\mathcal{H} = -2 \sum_{ij} J_{ij}^z S_i^z S_j^z - g\mu_B \sum_i \mathbf{B}_i \mathbf{S}_i. \quad (6.1)$$

Eine interessante Situation entsteht, wenn die Magnetfelder \mathbf{B}_i in x -Richtung zeigen: dann hat man wegen $[S_i^z, S_i^\pm] = \pm S_i^\pm$ am selben Gitterplatz nicht-kommutierende Operatoren und kann interessante quantenmechanische Effekte erwarten.

Wir betrachten das Modell in einer Dimension auf einem ‘Ring’ mit N Gitterplätzen und schreiben alles gleich mit Pauli-Matrizen,

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N g_i \sigma_i^x - \sum_{i=1}^N J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \quad \sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z. \quad (6.2)$$

In der Standard-Version¹ werden die Kopplungsparameter als i -unabhängig angenommen, man hat also Translationsinvarianz entlang des Rings;

$$\mathcal{H} = -g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x - J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \quad \sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z, \quad J > 0. \quad (6.3)$$

Es wird wieder die ferromagnetische Version $J > 0$ betrachtet.

6.2.1 Extreme Grenzfälle

Für $J = 0$ spielt nur noch der erste Term $-g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x$ im Hamiltonian eine Rolle, d.h. wir approximieren \mathcal{H} durch $\mathcal{H}_{J=0} \equiv -g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x$. Die σ_i^x haben jeweils Eigenzustände

$$|\rightarrow\rangle_i \equiv \frac{|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i}{\sqrt{2}}, \quad |\leftarrow\rangle_i \equiv \frac{|\uparrow\rangle_i - |\downarrow\rangle_i}{\sqrt{2}}, \quad (6.4)$$

zu den Eigenwerte $+1$ bzw. -1 in der σ_i^z -Basis. Der eindeutige Grundzustand von $\mathcal{H}_{J=0}$ ist also

$$|GZ\rangle_{J=0} = \prod_{i=1}^N |\rightarrow\rangle_i, \quad E_{J=0} = -Ng \quad (6.5)$$

d.h. alle Spins zeigen in Richtung des magnetischen Feldes, die Grundzustandenergie ist $E_{J=0} = -Ng$, und es gilt

$$\langle GZ | \sigma_i^z | GZ \rangle_{J=0} = 0, \quad \langle GZ | \sigma_i^z \sigma_j^z | GZ \rangle_{J=0} = 0, \quad i \neq j \quad (6.6)$$

¹ vgl. G. Schaller, R. Schützhold, Quantum Information and Computation **10**, 0109 (2010). Im Lehrbuch von S. SACHDEV wird statt g der Parameter gJ benutzt, so dass g dimensionslos bleibt.

d.h. es gibt keine Magnetisierung und keine Korrelationen der Magnetisierung im Grundzustand.

Umgekehrt ist für $g = 0$ der Hamiltonian $\mathcal{H}_{g=0} \equiv -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ relevant. Hier gibt es jetzt eine *zweifache Entartung* der Grundzustandsenergie: die beiden Zustände

$$|\uparrow\rangle \equiv \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i, \quad |\downarrow\rangle \equiv \prod_{i=1}^N |\downarrow\rangle_i \quad (6.7)$$

sind jeweils Grundzustände des Hamiltonians $\mathcal{H}_{g=0}$ mit der Energie $E_{g=0} = -NJ$. Es gilt

$$\langle GZ | \sigma_i^z | GZ \rangle_{g=0} = \pm 1, \quad \langle GZ | \sigma_i^z \sigma_j^z | GZ \rangle_{g=0} = 1, \quad i \neq j, \quad (6.8)$$

es gibt also eine endliche Magnetisierung und eine endliche Korrelation der Magnetisierung auch weit voneinander entfernter Gitterplätze i, j .

Die Entartung der Grundzustände ist zweifach, weil beide Spineinstellungen den gleichen Wert für die Energie liefern. In Wirklichkeit wird bei einer minimalen Störung durch ein Magnetfeld einer der beiden Grundzustände vom System bevorzugt werden, und diese Entartungssymmetrie wird gebrochen.

Interessant wird diese Brechung der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie im thermodynamischen Limes, d.h. beim Grenzübergang $N \rightarrow \infty$, und bei endlichem g und J : dann tritt die Brechung der \mathbb{Z}_2 -Symmetrie nämlich sogar bei kleinem, aber endlichen $g \ll J$ auf. Zunächst gibt es für endliches N dann keine Entartung, sondern als Grundzustand im Wesentlichen eine Überlagerung von $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, die durch Matrixelemente $\langle \uparrow | \left(-g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \right)^n | \downarrow \rangle$ bestimmt wird, wobei n von der Ordnung der Störungstheorie bestimmt wird. Für $N \rightarrow \infty$ verschwinden solche Matrixelemente aber immer, denn es gibt immer noch zu viele Spins, die von der Störung nicht geflippt worden sind. Das System sucht sich dann einen der Grundzustände aus, der dann eine geringere Symmetrie als der ursprüngliche Hamiltonian hat (was für endliches N nicht sein kann). Man spricht dann von *spontaner Symmetriebrechung*.

6.2.2 Störungstheorie um $J = 0$

Hier ist also der Grundzustand, von dem wir ausgehen, $|GZ\rangle_{J=0} = \prod_{i=1}^N |\rightarrow\rangle_i$. Angeregte Eigenzustände von $\mathcal{H}_{J=0}$ sind Zustände mit ein oder mehr Spinflips;

$$|l\rangle \equiv |\leftarrow\rangle_l \prod_{i \neq l}^N |\rightarrow\rangle_i, \quad |ll'\rangle \equiv |\leftarrow\rangle_l |\leftarrow\rangle_{l'} \prod_{i \neq l, l'}^N |\rightarrow\rangle_i, \dots \quad (6.9)$$

Die ‘Einteilchen-Zustände’ $|l\rangle$ sind alle degeneriert und haben die Energie $-Ng + 2g$, also die Anregungsenergie $2g$. Entsprechend sind auch die ‘Zweiteilchen-Zustände’ $|ll'\rangle$ alle degeneriert, usw. Zur Störungstheorie mit Störoperator $\mathcal{H}_J \equiv -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ benötigen wir die Matrixelemente von \mathcal{H}_J in der Basis $|GZ\rangle_{J=0}$, $|l\rangle$, $|ll'\rangle$ usw. Wir haben

$$\langle GZ | \mathcal{H}_J | GZ \rangle = 0, \quad \langle l | \mathcal{H}_J | l' \rangle = -J (\delta_{l, l'+1} + \delta_{l, l'-1}), \dots \quad (6.10)$$

Wir haben hier entartete Störungstheorie und müssen den Störoperator diagonalisieren, was in niedrigster Ordnung in J auf die Basis

$$|GZ\rangle, \quad |k\rangle \quad (6.11)$$

führt, in denen V diagonal ist mit den Eigenwerten $0, -2J \cos k$, wobei letztere natürlich wieder die Eigenwerte des tight-binding Modells in einer Dimension sind. In niedrigster Näherung ist die Energie E_0 des Grundzustands und die der Anregungen ε_k dann

$$E_0 = -Ng, \quad \varepsilon_k = 2g - 2J \cos k. \quad (6.12)$$

6.2.3 Störungstheorie um $g = 0$

Hier ist $V \equiv -g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x$ die Störung.

Die Matrixelemente von V verschwinden in der Basis der beiden entarteten Grundzustände für $g = 0$, $|\uparrow\rangle \equiv \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i$ und $|\downarrow\rangle \equiv \prod_{i=1}^N |\downarrow\rangle_i$, denn $V = -g2J_x$ mit dem Drehimpulsoperator J_x zum Drehimpuls $j = N/2$ (AUFGABE).

Einfach angeregte Eigenzustände von $\mathcal{H}_{g=0} \equiv -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ sind solche, bei denen nach der Gitter-Stelle l die Spin-Richtung flippt und sonst nirgends,

$$\begin{aligned} |l\rangle_{\uparrow} &\equiv |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \dots |\uparrow\rangle_l |\downarrow\rangle_{l+1} |\downarrow\rangle_{l+2} \dots \\ |l\rangle_{\downarrow} &\equiv |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \dots |\downarrow\rangle_l |\uparrow\rangle_{l+1} |\uparrow\rangle_{l+2} \dots \end{aligned} \quad (6.13)$$

Sie sind alle wieder entartet, ihre Anregungsenergie ist durch die Energiekosten für die Errichtung der ‘Wand’ zwischen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ bestimmt, die gerade $2J$ beträgt. Solche Zustände führen durch Diagonalisieren von V wieder zu kollektiven Anregungen mit der Energie

$$\varepsilon_k = 2J - 2g \cos k. \quad (6.14)$$

6.2.4 Exakte Lösung

Zur Bestimmung der exakten Lösung benutzen wir die Jordan-Wigner-Transformation, wobei wir zunächst im Spinraum rotieren (um die y -Achse, AUFGABE):

$$\sigma_i^z \rightarrow \sigma_i^x, \quad \sigma_i^x \rightarrow -\sigma_i^z, \quad (6.15)$$

womit man also

$$\mathcal{H} = g \sum_i \sigma_i^z - J \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \quad (6.16)$$

erhält. Mit

$$\sigma_i^z = 2c_i^\dagger c_i - 1, \quad \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x = (c_i^\dagger - c_i)(c_{i+1}^\dagger + c_{i+1}) \quad (6.17)$$

haben wir also

$$\mathcal{H} = g \sum_i \left(2c_i^\dagger c_i - 1 \right) - J \sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_{i+1} c_i \right), \quad (6.18)$$

wobei wir uns hier um die Randterme nicht gekümmert haben, da wir gleich eine unendlich lange Kette betrachten werden.

Wie beim schwach wechselwirkenden Bose-Gas haben wir hier im Hamiltonian also wieder Terme mit zwei Erzeugern bzw. zwei Vernichtern, weshalb wir eine Bogoliubov-Transformation verwenden müssen. Zunächst machen wir allerdings wie immer bei gitterperiodischen Problemen die Fourierentwicklung

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j c_j e^{-ikj}, \quad c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikj} = \frac{1}{N} \sum_{kn} c_n e^{-ik(n-j)} = \frac{1}{N} \sum_n N c_n \delta_{n,j} \\ &\rightsquigarrow \sum_j \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) = \frac{1}{N} \sum_{kk'j} \left(c_k^\dagger c_{k'} e^{-ikj+ik'(j+1)} + c_k^\dagger c_{k'} e^{-ik(j+1)+ik'j} \right) \\ &= \sum_{kk'} \left(c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k,k'} e^{ik} + c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k,k'} e^{-ik} \right) = \sum_k c_k^\dagger c_k 2 \cos k \\ &\rightsquigarrow \sum_j c_j^\dagger c_j = \sum_k c_k^\dagger c_k \\ &\rightsquigarrow \sum_j c_{j+1} c_j = \frac{1}{N} \sum_{kk'j} c_k c_{k'} e^{ik(j+1)+ik'j} = \sum_{kk'} \delta_{k,-k'} e^{ik} c_k c_{k'} = \sum_k e^{ik} c_k c_{-k} \\ &= \frac{1}{2} \sum_k e^{ik} (c_k c_{-k} - c_{-k} c_k) = i \sum_k \sin k c_k c_{-k} = -i \sum_k \sin k c_{-k} c_k \end{aligned} \quad (6.19)$$

Insgesamt also

$$\mathcal{H} = \sum_k \left((2g - 2J \cos k) c_k^\dagger c_k - g - Ji \sin k \left(c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_k c_{-k} \right) \right). \quad (6.20)$$

Darauf können wir nun eine Bogoliubov-Transformation loslassen. Die Details sind etwas anders als bei der bosonischen Bogoliubov-Transformation, da wir jetzt ja Anti-Vertauschungsrelationen haben. Das Ergebnis ist (SACHDEV)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_k \varepsilon_k \left(\gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2} \right), \quad \{ \gamma_k, \gamma_{k'}^\dagger \} = \delta_{kk'} \\ \varepsilon_k &= 2 (J^2 + g^2 - 2Jg \cos k)^{1/2} \end{aligned} \quad (6.21)$$

Die exakte Grundzustandenergie ist dann also

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_k = -\sum_k (J^2 + g^2 - 2Jg \cos k)^{1/2} \quad (6.22)$$

Wir können die Ergebnisse entwickeln und unsere störungstheoretischen Ergebnisse überprüfen; insbesondere finden wir

$$\begin{aligned}\varepsilon_k &= 2g \left(1 - \frac{J}{g} \cos k + O\left(\frac{J}{g}\right)^2 \right) \\ &= 2J \left(1 - \frac{g}{J} \cos k + O\left(\frac{g}{J}\right)^2 \right).\end{aligned}\quad (6.23)$$

6.2.5 Der Quantenphasenübergang

Die Anregungsenergien ε_k , Gl. (6.21) sind positiv für $g \neq J$. Die minimale Anregungsenergie (SACHDEV) ist bei $k = 0$ und durch

$$\min_k \varepsilon_k = 2|J - g| \quad (6.24)$$

gegeben, für $g = J$ verschwindet sie also. An dieser Stelle passiert also etwas.

Wir betrachten die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes,

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_k \rightarrow -J \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \left(1 + (g/J)^2 - 2(g/J) \cos k \right)^{1/2} \quad (6.25)$$

Das Integral läßt sich durch ein elliptisches Integral \mathcal{E} ausdrücken. Damit können wir die Grundzustandsenergie *pro Gitterplatz* als

$$-\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_0}{JN} = \frac{2}{\pi} (1 + g/J) \mathcal{E} \left(\frac{4g/J}{(1 + (g/J)^2)} \right), \quad g, J > 0 \quad (6.26)$$

schreiben. Das elliptische Integral

$$\mathcal{E}(z) \equiv \int_0^{\pi/2} (1 - z \sin^2 \phi)^{1/2} d\phi \quad (6.27)$$

hat als Funktion der komplexen Variablen z einen Verzweigungsschnitt von $z = 1$ bis $z = \infty$. Bei $g = J$ ist die Grundzustandsenergie also als Funktion z.B. des Parameters g *nicht analytisch*: Die zweite Ableitung divergiert (Bild).

Wir fassen zusammen: Bei $g = J$ verschwindet die Anregungsenergie, und die Grundzustandsenergie ist nicht-analytisch. Ein solches Phänomen ist ein Indiz für einen *Quantenphasenübergang*.

6.3 Das Lipkin-Meshkov-Glick-Modell im Gleichgewicht

Hier wollen wir das Phänomen eines Quantenphasenübergangs noch einmal an Hand eines weiteren, exakt lösbaren Modelles untersuchen. Der Hamiltonian ist eine Version des Heisenberg-Hamiltonians mit N Spin-1/2s in einem konstanten Magnetfeld h in

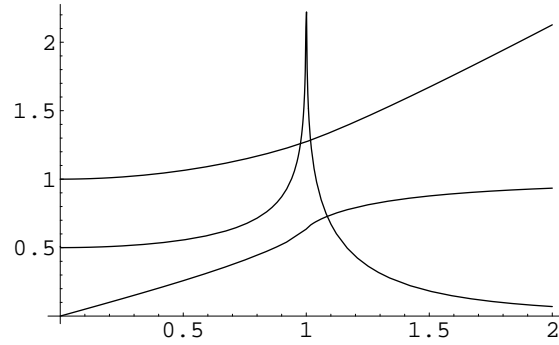


Fig. 6.1: Grundzustandsenergie $-E_0/JN$, Gl. (6.26) und ihre erste und zweite Ableitung als Funktion von g/J .

z -Richtung, die alle unabhängig von ihrem Abstand auf dem Gitter miteinander wechselwirken;

$$\mathcal{H} = -\frac{\lambda}{N} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i^x \sigma_j^x - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad \lambda, h > 0. \quad (6.28)$$

Wenn wir das mit kollektiven Spin-Operatoren

$$S_\alpha \equiv \frac{1}{2} \sum_i^N \sigma_i^\alpha, \quad \alpha = x, y, z \quad (6.29)$$

schreiben, erhalten wir die einfache Form

$$\mathcal{H} = -\frac{2\lambda}{N} S_x^2 - 2h S_z, \quad \lambda, h > 0. \quad (6.30)$$

Im Folgenden nehmen wir an, dass der kollektive Spin den maximal möglichen Betrag

$$S = \frac{N}{2} \quad (6.31)$$

hat. Wir arbeiten also von nun an in einem Unterraum des Hilbertraums mit konstantem $S = N/2$.

Die Skalierung der Kopplungskonstante λ/N im Hamiltonian ist notwendig, um einen sinnvollen thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ des Modells zu erhalten, wie wir gleich sehen werden.² Die Annahme einer Wechselwirkung der Spins unabhängig von ihrem Abstand ist das extreme Gegenteil von der bis hier meist diskutierten Nächste-Nachbar-Wechselwirkung. Insbesondere geht jetzt die Struktur und die Dimension des Gitters

² Eine allgemeinere Version des Modells hat die Form $\mathcal{H} = -\frac{1}{N}(\gamma_x S_x^2 + \gamma_y S_y^2) - h S_z$, vgl. P. Ribeiro, J. Vidal und R. Mosseri, Phys. Rev. E **78**, 021106 (2008) oder S. Dusuel und J. Vidal, Phys. Rev. B **71**, 224420 (2005)

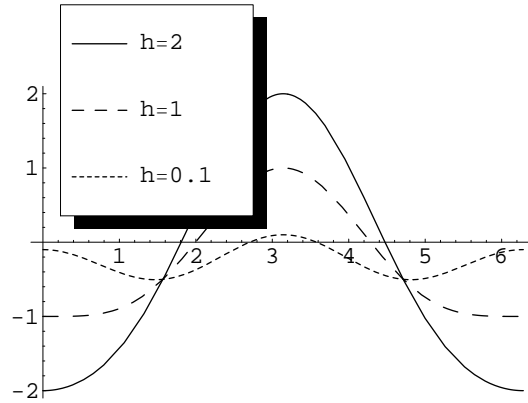


Fig. 6.2: Klassische Energie $\frac{E}{\lambda N}$ beim Lipkin-Meshkov-Glick-Modell, Gl. (6.34) als Funktion von θ für verschiedene Werte von h (hier ist $\lambda = 1$ gesetzt).

gar nicht mehr ein, und wir erwarten sehr einfache Physik. Zumindest für den Grenzfall $N \rightarrow \infty$ ist das auch der Fall. Wir erwarten, dass sich für große N der kollektive Spin fast klassisch verhält (das war der Ausgangspunkt der Holstein-Primakoff-Transformation, die wir gleich benutzen werden). Der mit N skalierte und in Einheiten von λ gemessene Hamiltonian

$$\frac{\mathcal{H}}{\lambda N} = -\frac{1}{2}s_x^2 - \frac{h}{\lambda}s_z, \quad s_\alpha \equiv \frac{S_\alpha}{S}, \quad S \equiv \frac{N}{2}, \quad \alpha = x, z \quad (6.32)$$

ist dann durch Spinkomponenten s_x, s_z auf der Einheits-Blochugel gegeben und hängt nur noch von dem Verhältnis $\frac{h}{\lambda}$ ab.

6.3.1 Klassische Betrachtung

Wir betrachten den kollektiven Spin $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ als eine *klassische* Größe und parametrisieren

$$\mathbf{S} = S(\sin \theta, 0, \cos \theta), \quad (6.33)$$

wobei wir gleich von vorneherein davon ausgehen, dass wegen der Symmetrie des Hamiltonians der Spin in seinem Grundzustand irgendwo in der x - z -Ebene liegt (hierfür müssen wir den Winkel θ zwischen 0 und 2π zulassen). Wir ersetzen nun den Hamiltonian \mathcal{H} durch eine klassische Energie E , indem wir für $s_{x,z}$ einfach die klassische Parametrisierung einsetzen,

$$\frac{\mathcal{H}}{\lambda N} \rightarrow \frac{E}{\lambda N} \equiv -\frac{1}{2}\sin^2 \theta - \frac{h}{\lambda}\cos \theta. \quad (6.34)$$

Diese Energie kann als Funktion von θ minimiert werden, was auf

$$-\sin \theta \left(\cos \theta - \frac{h}{\lambda} \right) = 0 \quad (6.35)$$

führt. Die Lösungen sind durch $\sin \theta = 0$ oder $\cos \theta = \frac{h}{\lambda}$ gegeben. Der Fall $\theta = 0(2\pi)$ entspricht einem Minimum, falls $h > \lambda$, während $\cos \theta = \frac{h}{\lambda}$ zwei äquivalente Minima auf dem Intervall $[0, 2\pi]$ für $h < \lambda$ definiert ($\theta = \pi$ ist ein Maximum), vgl. das Bild. Für den zur niedrigsten Energie gehörenden klassischen Spin ergibt sich also folgendes Szenario;

$$\mathbf{S} = S(0, 0, 1), \quad h > \lambda, \quad \text{‘symmetrische Phase’} \quad (6.36)$$

$$\mathbf{S} = S\left(\pm \sqrt{1 - \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2}, 0, \frac{h}{\lambda}\right), \quad h < \lambda, \quad \text{‘gebrochene Phase’}. \quad (6.37)$$

Der Ausdruck ‘gebrochene Phase’ bezieht sich hier auf die zwei äquivalenten Minima, von denen im thermodynamischen Limes nach dem Prinzip der spontanen Symmetriebrechung wieder nur eines vom System angenommen wird. In der symmetrischen Phase gewinnt das Magnetfeld h über die Austauschwechselwirkung λ und alle Spins zeigen in Richtung des Magnetfeldes. In der gebrochenen Phase gewinnt umgekehrt die Austauschwechselwirkung λ über das Magnetfeld, für $\lambda \rightarrow \infty$ oder $h \rightarrow 0$ zeigen die Spins in die x -Richtung.

Die entsprechenden Energien sind

$$\frac{E}{\lambda N} = -\frac{h}{\lambda}, \quad h > \lambda, \quad \text{‘symmetrische Phase’} \quad (6.38)$$

$$\frac{E}{\lambda N} = -\frac{1}{2} \left(1 + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 \right), \quad h < \lambda, \quad \text{‘gebrochene Phase’}. \quad (6.39)$$

Als Funktion von $\frac{h}{\lambda}$ ist die E wieder nicht-analytisch bei $h = \lambda$ (die zweite Ableitung ist unstetig, SKIZZE!).

6.3.2 Holstein-Primakoff-Transformation

Das obige klassische Bild kann nun mit Hilfe der Holstein-Primakoff-Transformation rigoros untermauert werden. Die Idee ist also wieder eine Darstellung des großen Spins durch einen harmonischen Oszillator, der in erster Näherung Anregungen um den Grundzustand bestimmt. Wie wir oben gesehen haben, gibt es aber offensichtlich je nach den Parametern unterschiedliche Grundzustände, und wir müssen den Oszillator deshalb z.B. so verschieben können, dass er auch Anregungen um den Grundzustand in der gebrochenen Phase beschreibt. Ein verschobener Oszillator wird nun mit Hilfe der Leiteroperatoren durch

$$a \rightarrow a + \alpha \quad (6.40)$$

erzeugt, was auf kohärente Zustände mit dem Parameter α führt (SKRIPT QM I). Im allgemeinen ist $\alpha \in \mathbb{C}$ komplex, zum Glück kommen wir hier in unserem Spezialfall des LMG-Modells mit reellem α aus.

Wir setzen deshalb in der HP-Darstellung von S_z

$$S_z = S - \alpha^2 - \alpha(a + a^\dagger) - a^\dagger a. \quad (6.41)$$

Der Vergleich mit dem klassischen $S_z = S \cos \theta$ liefert

$$S - \alpha^2 = S \cos \theta \rightsquigarrow \alpha^2 = S(1 - \cos \theta). \quad (6.42)$$

Im Folgenden wollen wir die Operatoren und insbesondere den Hamiltonoperator entwickeln, und zwar geordnet absteigend nach Termen proportional zu $S, \sqrt{S}, 1, \dots$. An der Darstellung von S_z erkennen wir bereits, dass der in den a, a^\dagger lineare Term der nach dem konstanten Term ($\propto S$) führende Term ($\propto \sqrt{S}$) ist. Der nächste ist quadratisch in den Leiteroperatoren. Die Idee ist nun, den Hamiltonian um einen seiner (zu bestimmenden) Grundzustände herum zu entwickeln und dazu α so zu wählen, dass wie bei jeder Taylorentwicklung um ein Minimum der lineare Term in den a, a^\dagger wegfällt. Entwickelt man bis zur quadratischen Ordnung in den a, a^\dagger , so erhält man effektive Hamiltonians, die das Anregungsspektrum um die jeweiligen Grundzustände beschreiben.

Wir führen dieses Programm hier explizit nur bis zur linearen Ordnung vor, um damit unser klassisches Ergebnis für die Grundzustände und ihre Energie zu verifizieren. In der Entwicklung haben wir für S_+ dann

$$\begin{aligned} S_+ &= \sqrt{2S - (a^\dagger + \alpha)(a + \alpha)(a + \alpha)} \\ &= \sqrt{2S - \alpha^2} \left(1 - \frac{\alpha}{2} \frac{a + a^\dagger}{2S - \alpha^2} + \dots \right) (a + \alpha) \\ &= \alpha \sqrt{2S - \alpha^2} + a \left(\sqrt{2S - \alpha^2} - \frac{\alpha^2}{2\sqrt{2S - \alpha^2}} \right) - a^\dagger \frac{\alpha^2}{2\sqrt{2S - \alpha^2}} + \dots \end{aligned} \quad (6.43)$$

Wir können das umwandeln in

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \sqrt{2S - \alpha^2} \left(\alpha + \frac{1}{2}(a + a^\dagger) \left(1 - \frac{\alpha^2}{2S - \alpha^2} \right) + \dots \right) \\ S_x^2 &= (2S - \alpha^2) \left(\alpha^2 + \alpha(a + a^\dagger) \left(1 - \frac{\alpha^2}{2S - \alpha^2} \right) + \dots \right) \end{aligned} \quad (6.44)$$

Eingesetzt in den Hamiltonian ergibt das also

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\lambda}{S} S_x^2 - 2h S_z = E_{\text{cl}} - (a + a^\dagger) \left[\frac{\lambda}{S} \alpha (2S - 2\alpha^2) - 2h\alpha \right] + O(a^2, a^\dagger a, (a^\dagger)^2) \\ E_{\text{cl}} &\equiv -\frac{\lambda}{S} \alpha^2 (2S - \alpha^2) - 2h(S - \alpha^2). \end{aligned} \quad (6.45)$$

Wenn der lineare Term $\propto a + a^\dagger$ verschwinden soll, muss die eckige Klammer Null sein. Das liefert die Bestimmungsgleichung für die Verschiebung α ;

$$\alpha = 0, \quad \text{'symmetrische Phase'} \quad (6.46)$$

$$S - \alpha^2 = S \frac{h}{\lambda}, \quad \text{'gebrochene Phase'}. \quad (6.47)$$

Wegen $S - \alpha^2 = S \cos \theta$ liefert das wieder entweder $\theta = 0$ oder die zwei Lösungen für θ mit $\cos \theta = h/\lambda$, exakt wie im oben diskutierten klassischen Fall. Ebenso gilt das für

den konstanten Term im Hamiltonian

$$\begin{aligned} E_{\text{cl}} &\equiv -\frac{\lambda}{S}\alpha^2(2S - \alpha^2) - 2h(S - \alpha^2) = -\lambda S(1 - \cos\theta)(1 + \cos\theta) - 2hS \cos\theta \\ &= -2S \left(\frac{1}{2}\lambda \sin^2\theta + h \cos\theta \right), \end{aligned} \quad (6.48)$$

was mit Gl. (6.34) übereinstimmt.

6.4 Quantenphasenübergang mit Dissipation

Vielleicht der einfachste Weg, einen Quantenphasenübergang für Dissipation ‘zu öffnen’, ist eine dynamische Beschreibung über eine Mastergleichung vom Typ Gl. (4.95),

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}\rho(t) \equiv -i[\mathcal{H}, \rho(t)] + \mathcal{D}\rho(t) \quad (6.49)$$

$$\equiv -i[\mathcal{H}, \rho(t)] + \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \left(J_{\mu}\rho(t)J_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2}\rho(t)J_{\mu}^{\dagger}J_{\mu} - \frac{1}{2}J_{\mu}^{\dagger}J_{\mu}\rho(t) \right). \quad (6.50)$$

Hierbei soll \mathcal{H} der Hamiltonian z.B. des LMG-Modells sein.

6.4.1 Grundsätzliche Fragen

Zwei Probleme stellen sich hier:

- Kann Gl. (6.49) mikroskopisch abgeleitet werden? Wie hängen z.B. die Raten γ_{μ} von den Kontrollparametern des Quantenphasenübergangs ab? Dürfen z.B. die Raten als konstant angenommen werden?
- Wie läßt sich ein durch Gl. (6.49) beschriebener Quantenphasenübergang überhaupt analysieren?

Eine Möglichkeit, die zweite Frage zu beantworten, nutzt eine Analogie zu Quantenphasenübergängen im Gleichgewicht aus. Beim Quanten-Ising-Modell hatten wir ja z.B. gefunden, dass die Anregungsenergien ε_k , Gl. (6.21) bei $k = 0$ durch $\min_k \varepsilon_k = 2|J - g|$ gegeben sind, also am Phasenübergang bei $g = J$ verschwinden.

Analog betrachtet man nun im Nichtgleichgewicht die Eigenwerte λ_k (und Eigenzustände) des Liouvillian \mathcal{L} ,

$$\mathcal{L}\rho_k = \lambda_k\rho_k. \quad (6.51)$$

In der Matrixdarstellung ist \mathcal{L} nicht hermitesch und die λ_k sind deshalb komplex. Einer von ihnen (bei eindeutiger Lösung) verschwindet ($\lambda_0 = 0$), er gehört zur stationären Lösung der Mastergleichung Gl. (6.49). Alle anderen erfüllen

$$\text{Re}\lambda_k < 0. \quad (6.52)$$

Anschaulich entspricht das einem exponentiellen Zerfall beliebiger Anfangszustände hin zum stationären Zustand. Als Analogie zur Anregungsenergien ε_k oben wird deshalb als Kriterium für einen Phasenübergang das Verschwinden des Eigenwerts mit maximalem, von Null verschiedenem Eigenwerts λ_k vorgeschlagen.³

6.4.2 Offenes Lipkin-Meshkov-Glick-Modell

⁴ Wir betrachten die Mastergleichung eines durch eine Lindblad-Mastergleichung beschriebenen dissipativen LMG-Modells;

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[\mathcal{H}, \rho(t)] + \frac{\Gamma}{N}\mathcal{D}[S_+]\rho(t), \quad \mathcal{H} = -\frac{2\lambda}{N}S_x^2 - 2hS_z \quad (6.53)$$

$$\mathcal{D}[A]\rho \equiv 2A\rho A^\dagger - \rho A^\dagger A - A^\dagger A\rho. \quad (6.54)$$

Es läßt sich physikalisch aus einer Anwendung mit optischen Kavitäten motivieren und herleiten, was insbesondere für den Term $\frac{\Gamma}{N}\mathcal{D}[S_+]\rho(t)$ nicht-trivial ist. Die Analyse des Modells ist, im Rahmen der jetzt zu diskutierenden Näherungen, jedoch relativ einfach.

Wir leiten näherungsweise Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte

$$(X, Y, Z) \equiv \frac{2}{N}(\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle) \quad (6.55)$$

her mit $\langle S_\alpha \rangle \equiv \text{Tr}\rho(t)S_\alpha$. Aus der Drehimpulsalgebra

$$[S_x, S_y] = iS_z, \quad [S_z, S_x] = iS_y, \quad [S_y, S_z] = iS_x, \quad [S_+, S_-] = 2S_z \quad (6.56)$$

folgt z.B.

$$\begin{aligned} -i\text{Tr}[\mathcal{H}, \rho(t)]S_x &= -i\text{Tr}\rho(t)[S_x, \mathcal{H}] = -i\text{Tr}\rho(t)[S_x, -2hS_z] = 2h\text{Tr}\rho(t)S_y \\ &\rightsquigarrow \dot{X} = 2hY, \quad \text{für } \Gamma = 0. \end{aligned} \quad (6.57)$$

Für den Dissipator benötigen wir

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\text{Tr}(2S_+\rho S_-(S_+ + S_-) - \rho S_- S_+(S_+ + S_-) - (S_+ + S_-)S_- S_+\rho) \\ &= \frac{1}{2}\text{Tr}\rho(2S_-(S_+ + S_-)S_+ - S_- S_+(S_+ + S_-) - (S_+ + S_-)S_- S_+) \\ &= \frac{1}{2}\text{Tr}\rho([S_-, S_+]S_+ + S_-[S_-, S_+]) = -\text{Tr}\rho(S_z S_+ + S_- S_z), \end{aligned} \quad (6.58)$$

womit wir insgesamt

$$\frac{d}{dt}\langle S_x \rangle = 2h\langle S_y \rangle - \frac{\Gamma}{N}(\langle S_z S_+ \rangle + \langle S_- S_z \rangle) \quad (6.59)$$

³ siehe z.B. E. M. Kessler, G. Giedke, A. Imamoglu, S. F. Yelin, M. D. Lukin, J. I. Cirac, arXiv:1205.3341 (2012).

⁴ S. Morrison, A. S. Parkins, Phys. Rev. Lett. **100**, 040403 (2008).

bekommen. An dieser Stelle kommen wir nicht weiter, denn hier erhalten wir neue Erwartungswerte wie $\langle S_z S_+ \rangle$ und die Bewegungsgleichungen schliessen nicht.

Ein üblicher Ausweg ist eine *Faktorisierungs-Näherung*,

$$\langle S_z S_+ \rangle \approx \langle S_z \rangle \langle S_+ \rangle, \quad \langle S_- S_z \rangle \approx \langle S_- \rangle \langle S_z \rangle \quad (6.60)$$

die große Ähnlichkeit mit Molekularfeldnäherungen z.B. in der statistischen Mechanik hat (vgl. das Isingmodell, SKRIPT THERMODYNAMIK). Für $N \rightarrow \infty$ vermutet man, dass sich der kollektive Spin praktisch klassisch verhält, d.h. man ersetzt z.B. den Operator S_x wieder wie oben durch eine klassische Variable und vernachlässigt deren Fluktuationen. Mit dieser *mean-field-Näherung* erhalten wir durch Multiplikation mit $2/N$ die Gleichung für X , und entsprechend auch die für Y und Z (NACHRECHNEN)

$$\dot{X} = 2hY - \Gamma ZX \quad (6.61)$$

$$\dot{Y} = -2hX + 2\lambda ZX - \Gamma ZY \quad (6.62)$$

$$\dot{Z} = -2\lambda XY + \Gamma(X^2 + Y^2). \quad (6.63)$$

Wir erhalten also ein System von drei gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen, die durch die mean-field-Näherung *nichtlinear* geworden sind. Durch die Reduktion der Dimension des Gleichungssystems (auf nur drei statt eines viel größeren Systems mit Erwartungswerten wie $\langle S_z S_+ \rangle$ oder komplizierter) handeln wir uns die Nichtlinearität ein. Die dissipativen Terme $\propto \Gamma$ erscheinen in natürlicher Weise in dieses Näherungs-Schema hineinzupassen. Die Rechtfertigung, Überprüfung und Verbesserung von Näherungsannahmen wie der obigen ist häufig ein wichtiges Thema in der theoretischen Beschreibung.

Nicht-dissipativer Fall $\Gamma \equiv 0$. — In diesem Fall gibt es zunächst eine Symmetrie des Systems

$$h \rightarrow -h, \quad X \rightarrow -X, Z \rightarrow -Z, \quad (6.64)$$

weshalb eine Analyse für positives Magnetfeld $h \geq 0$ ausreicht. Es gibt zwei Fixpunkte des Systems Gl. (6.61),

$$(X, Y, Z) = (0, 0, 1), \quad h > \lambda \quad (6.65)$$

$$(X, Y, Z) = (\pm \sqrt{1 - h^2/\lambda^2}, 0, h/\lambda), \quad 0 \leq h \leq \lambda. \quad (6.66)$$

Das läßt sich wegen der Symmetrie hin zu $h < 0$ fortsetzen. Man erhält also in der stationären Lösung für X als Funktion von h durch Stabilitätsanalyse eine superkritische Heugabel-Bifurkation (SKRIPT MECHANIK, SKIZZE) bei den kritischen Magnetfeldern

$$\pm h^c = \pm \lambda \quad (6.67)$$

(es wird immer $\lambda > 0$ angenommen). Für $\Gamma \equiv 0$ reproduzieren wir damit unser schon bekanntes Ergebnis für den Quantenphasenübergang zweiter Ordnung ohne Dissipation.

Dissipativer Fall $\lambda > \Gamma > 0$.— In diesem Fall geht die Symmetrie Gl. (6.64) verloren. Es gibt *zwei* Werte h_{\pm}^c des Magnetfelds, an denen die stabilen Lösungen Bifurkationen aufweisen, mit Fixpunkten (NACHRECHNEN)

$$(0, 0, 1), \quad h < h_-^c, \quad h > h_+^c \quad (6.68)$$

$$(X_s, Y_s, Z_s), \quad h_-^c < h < h_+^c \quad (6.69)$$

$$X_s = \pm \sqrt{(\Lambda^2 - 4h^2)/2\lambda\Lambda}, \quad Y_s = \frac{\Gamma}{\Lambda} X_s, \quad Z_s = \frac{2h}{\Lambda}, \quad \Lambda \equiv \lambda^2 + \sqrt{\lambda^2 - \Gamma^2} \quad (6.70)$$

Die zwei Fixpunkte entsprechen zwei unterschiedlichen Arten von QPTs: ein QPT zweiter Ordnung bei h_+^c mit einer kontinuierlichen Bifurkation in $X(h)$ wie im Fall $\Gamma = 0$. Desweiteren ein QPT *erster* Ordnung bei h_-^c (also dort, wo vorher gar kein QPT stattfand) mit einer Diskontinuität in $X(h)$ (SKIZZE).

6.5 Quantentheorie des Lasers

Für den Laser gibt es eine Reihe von Zugängen, angefangen von phänomenologischen Gleichungen bis hin zu einer voll quantenmechanischen Beschreibung. Eine voll mikroskopische, im Wesentlichen alles erklärende Theorie für dieses Nichtgleichgewichts-Problem existiert bis heute aber wohl noch nicht ⁵.

Im Folgenden folgen wir der Darstellung der Theorie von *Scully* und *Lamb* in SCULLY/ZUBAIRY. Wir betrachten das Modell eines *Mikromasers* als eine spezielle Variante des Lasers, die auf die Wechselwirkung eines einzelnen Atoms mit einer einzelnen gedämpften Kavitätsmode hinausläuft. Solche Modelle von der Art des sogenannten ‘single-atom-laser’ sind in letzter Zeit wieder im Zusammenhang mit Festkörperbasierten künstlichen Zweiniveausystemen und vibronischen Moden, z.B. Phononen, aktuell geworden. ⁶

Ausgangspunkt ist eine einzelne photonische Kavitätsmode, die durch den Erzeuger a^\dagger beschrieben wird. Die Kavität ist offen, durch sie strömt eine Sequenz von Atomen, die zu Zeiten t_i ankommen und eine Zeit τ in der Kavität verbringen und dabei über den Jaynes-Cummings Hamiltonian (SKRIPT QM II)

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar g(\sigma_+ \hat{a} + \sigma_- \hat{a}^\dagger) + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (6.71)$$

mit den Photonen wechselwirken.

⁵ A. Knorr, private Mitteilung.

⁶ D. A. Rodrigues, J. Imbers, A. D. Armour, Phys. Rev. Lett **98**, 067204 (2007); S. Andr’e, V. Brocco, A. Shnirman, G. Schön, Phys. Rev. A **79**, 053848 (2009); R. Okuyama, M. Eto, and T. Brandes, arXiv:1205.6955 (2012); J. Kabuss, A. Carmele, T. Brandes, A. Knorr, Phys. Rev. Lett. (to appear, 2012).

6.5.1 Der Mikromaser

Wir entwickeln für dieses Problem wieder ein Grobkörnungsverfahren ähnlich wie in Abschnitt 4.5. Über das Flugzeitintervall $[0, \tau]$ ändert sich die Dichtematrix im WW-Bild gemäß

$$\rho(0) \rightarrow \rho(0) + \delta\rho(\tau, 0), \quad (6.72)$$

wobei $\delta(\tau)$ durch die unitäre Zeitentwicklung mit \mathcal{H}_{JC} bestimmt ist. Auf viel längeren Zeitskalen $\Delta t \gg \tau$ allerdings ändert sich die Dichtematrix gemäß

$$\frac{\rho(\Delta t) - \rho(0)}{\Delta t} = \mathcal{L}_{\text{eff}}\rho(0) \equiv \frac{N}{\Delta t}\delta\rho(\tau, 0), \quad (6.73)$$

was jetzt bereits eine Mittelung über viele unabhängige Flugzeitintervalle von N aufeinanderfolgenden Atomen einschließt. Die Größe

$$r \equiv \frac{N}{\Delta t} \quad (6.74)$$

ist hierbei die ‘Injektionsrate’ der Atome in die Kavität. Die Grobkörnungs-Mastergleichung wird dann (jetzt für beliebige Anfangszeiten t statt $t = 0$) formal durch den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ erhalten;

$$\frac{d}{dt}\rho_{\text{cg}}(t) = \mathcal{L}_{\text{eff}}\rho_{\text{cg}}(t). \quad (6.75)$$

(Wir lassen den Index cg im aus Notationsgründen im Folgenden wieder weg).

Den effektiven Liouvillian \mathcal{L}_{eff} erhalten wir konkret durch den Ansatz für die ‘Kurzzeitentwicklung’

$$\rho(\tau) = \sum_{nn'} e^{-i\mathcal{H}_{\text{JC}}\tau} |1n\rangle \rho_{nn'} \langle 1n'| e^{i\mathcal{H}_{\text{JC}}\tau}, \quad (6.76)$$

wobei der Anfangszustand des Atoms jeweils der angeregte Zustand $|1\rangle$ sein soll. Aus der Lösung des Jaynes-Cummings-Modells (NACHRECHNEN) folgt im WW-Bild nach der Zeit τ

$$|1n\rangle \rightarrow \cos g\tau\sqrt{n+1}|1n\rangle - i \sin g\tau\sqrt{n+1}|0n+1\rangle, \quad (6.77)$$

also

$$\langle 1n|\rho(\tau)|1n'\rangle = \rho_{nn'} \cos g\tau\sqrt{n+1} \cos g\tau\sqrt{n'+1} \quad (6.78)$$

$$\langle 0n|\rho(\tau)|0n'\rangle = \rho_{n-1n'-1} \sin g\tau\sqrt{n} \sin g\tau\sqrt{n'} \quad (6.79)$$

und damit für die Spur der Dichtematrix über die Atomzustände

$$\begin{aligned} \rho_{nn'}(\tau) &\equiv \sum_{\alpha} \langle \alpha n|\rho(\tau)|\alpha n'\rangle \\ &= \rho_{nn'}(0) \cos g\tau\sqrt{n+1} \cos g\tau\sqrt{n'+1} + \rho_{n-1n'-1}(0) \sin g\tau\sqrt{n} \sin g\tau\sqrt{n'}. \end{aligned} \quad (6.80)$$

In der Grobkörnungs-Zeitentwicklung wird das verallgemeinert zu beliebigen Anfangszeiten t . Die Grobkörnungs-Mastergleichung für die Dichtematrixelemente der Kavität lautet also

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{nn'}(t) &= r [\rho_{nn'}(t) (\cos \Omega_n \tau \cos \Omega_{n'} \tau - 1) + \rho_{n-1n'-1}(t) \sin \Omega_{n-1} \tau \sin \Omega_{n'-1} \tau] \\ \Omega_n &\equiv g\sqrt{n+1}. \end{aligned} \quad (6.81)$$

Auf diese Gleichung werden jetzt die Verlustterme durch das Entweichen von Photonen aus der Kavität aufaddiert. Letztere werden durch einen Lindblad-Dissipator wie beim gedämpften harmonischen Oszillator beschrieben (Photonen-Bad bei Temperatur $T = 0$), d.h. durch

$$\mathcal{D}[a]\rho = -\frac{\kappa}{2} (a^\dagger a \rho - 2a \rho a^\dagger + \rho a^\dagger a). \quad (6.82)$$

Das führt in der Fockbasis auf eine Gleichung für die Diagonalelemente $p(n, t) \equiv \rho_{nn}(t)$ (NACHRECHNEN)

$$\begin{aligned} \dot{p}(n, t) &= a_n p(n, t) + b_{n-1} p(n-1, t) + c_{n+1} p(n+1, t) \\ a_n &\equiv -r \sin^2 \Omega_n \tau - \kappa n, \quad b_n \equiv r \sin^2 \Omega_n \tau, \quad c_n = \kappa n. \end{aligned} \quad (6.83)$$

Wir sehen sofort, dass wegen $a_n + b_n + c_n = 1$ die Normierung $\sum_n p(n, t) = 1$ zeitlich konstant bleibt.

Die Funktion $p(n, t)$ beschreibt die *Photonenstatistik* als Verteilungsfunktion der Photonen *in* der Kavität zur Zeit t .⁷ Daraus können wir z.B. den Mittelwert der Photonen berechnen aus

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n \rangle_t &= \sum_n n \dot{p}(n, t) \\ &= \sum_n p(n, t) [-n(r \sin^2 \Omega_n \tau + \kappa n) + (n+1)r \sin^2 \Omega_n \tau + (n-1)\kappa n] \\ &= \sum_n p(n, t) [-\kappa n + r \sin^2 \Omega_n \tau]. \end{aligned} \quad (6.84)$$

Wir approximieren den Sinus durch sein Argument, $\sin^2 \Omega_n \tau \approx (g\tau)^2 (n+1)$, was gerechtfertigt ist, wenn $(g\tau)^2 (n+1) \ll 1$. Die Summe läuft über alle n , zumindest sollte also $\langle n \rangle_t \ll 1/(g\tau)^2$ als Konsistenz überprüft werden. Allerdings wird das nicht funktionieren, denn wir erhalten aus der daraus resultierenden linearen Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} \langle n \rangle_t \approx [-\kappa + r(g\tau)^2] \langle n \rangle_t + r(g\tau)^2 \quad (6.85)$$

eine Photonenzahl, die exponentiell wächst, falls

$$r(g\tau)^2 > \kappa, \quad \text{Mikro-Maser-Schwelle.} \quad (6.86)$$

⁷ Das ist nicht das gleiche wie die Zählstatistik $P(n, t)$ der aus der Kavität *emittierten* Photonen, wie wir sie z.B. mit Zählfeldern in Mastergleichungen hergeleitet haben.

Tatsächlich ist das eine Bedingung für den kleinsten Wert der Durchflugzeit τ , bei dem die Kavität das erste Mal kritisch wird und der stationäre Mittelwert $\langle n \rangle_{t \rightarrow \infty}$ sehr groß wird. Wegen der Periodizität der Koeffizienten in τ zeigt $\langle n \rangle_{t \rightarrow \infty}$ als Funktion von τ durch numerisches Auswerten tatsächlich ein oszillatorisches Verhalten, vgl. SCULLY/ZUBAIRY.

6.5.2 Der Scully-Lamb-Laser

Von der (ungedämpften) Mikromaser-Mastergleichung Gl. (6.87) ist es jetzt ein kleiner Schritt zu einer konventionellen Laser-Mastergleichung. Dabei wird angenommen, dass die zwei Niveaus $|0\rangle, |1\rangle$ im Laufe der Zeit mit identischen Raten γ in weitere Niveaus zerfallen, die dann nicht weiter mit der Kavität wechselwirken. Effektiv führt das zu einer Mastergleichung (SCULLY/ZUBAIRY)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{nn'}(t) &= r [\rho_{nn'}(t) \langle \cos \Omega_n \tau \cos \Omega_{n'} \tau - 1 \rangle + \rho_{n-1n'-1}(t) \langle \sin \Omega_{n-1} \tau \sin \Omega_{n'-1} \tau \rangle] \\ \langle \dots \rangle &\equiv \int_0^\infty d\tau \gamma e^{-\gamma\tau} \dots, \end{aligned} \quad (6.87)$$

in der über alle Flugzeiten gemittelt wird und somit der Zerfall der atomaren Zustände $|0\rangle, |1\rangle$ während des Durchflugs berücksichtigt wird.

Inklusive Dämpfung der Kavität ergibt sich aus den Diagonalelementen dann wieder eine Gleichung für die Photonenstatistik (WALLS/MILBURN)

$$\begin{aligned} \dot{p}(n, t) &= a_n p(n, t) + b_{n-1} p(n-1, t) + c_{n+1} p(n+1, t) \\ a_n &\equiv -G \frac{n+1}{1+(n+1)/n_s} - \kappa n, \quad b_n \equiv G \frac{n+1}{1+(n+1)/n_s}, \quad c_n = \kappa n \end{aligned} \quad (6.88)$$

mit den Laser-Parametern

$$G \equiv \frac{r}{2n_s}, \quad \text{Gain-Parameter} \quad (6.89)$$

$$n_s \equiv \frac{\gamma^2}{4g^2}. \quad (6.90)$$

Die Bedingung

$$G = \kappa, \quad \text{Laser-Schwelle} \quad (6.91)$$

stellt jetzt den Nichtgleichgewichts-Phasenübergang dar: als Funktion der Zeit steigt für $G > \kappa$ die mittlere Photonenzahl exponentiell an.

Die stationäre Photonenstatistik $t \rightarrow \infty$ wird unterhalb der Schwelle ($G < \kappa$) gut durch eine thermische Verteilung approximiert, während sie weit oberhalb der Schwelle durch eine *Poisson-Verteilung* gekennzeichnet ist.

6.5.3 Semiklassische Lasertheorie

Zum Abschluss diskutieren einen alternativen Zugang, der statt Mastergleichungen für den Zustand direkt von den Heisenberg-Bewegungsgleichungen für Erwartungswerte des Kavitäts-Atom-Systems ausgeht. Dazu starten wir wieder mit dem Jaynes-Cummings Hamiltonian für die resonante ($\omega = \omega_0$) Wechselwirkung eines Atoms (zwei Niveaus) mit dem Kavitätsphoton ('Einmoden-Laser'),

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z + \hbar g(\sigma_+\hat{a} + \sigma_-\hat{a}^\dagger) + \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (6.92)$$

und berechnen die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für Erwartungswerte (AUFGABE),

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle_t = i\langle [\mathcal{H}_{\text{JC}}, a] \rangle_t = -i\omega\langle a \rangle_t - ig\langle a\sigma_- \rangle_t \quad (6.93)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_- \rangle_t = -i\omega\langle \sigma_- \rangle_t + ig\langle \sigma_z a \rangle_t \quad (6.94)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_z \rangle_t = -2ig\left(\langle \sigma_+ a \rangle_t - \langle \sigma_- a^\dagger \rangle_t\right). \quad (6.95)$$

Den Einfluss der Dissipation kann man im Heisenbergbild auf durch Operatorwertige Langevin-Gleichungen berücksichtigen (SCULLY/ZUBAIRY). Hier benutzen wir eine vereinfachte Version, wo uns nur Mittelwerte von Observablen interessieren. Auf die kohärenten Jaynes-Cummings-Gleichungen addieren wir deshalb 'per Hand' die Dämpfungsterme durch spontane Emission aus der Kavität mit Rate κ und spontane Emission aus den atomaren Niveaus mit Rate γ , sowohl ein Pumpterms mit Rate R hin zu einer festen Inversion z_0 , also vier zusätzlichen Parametern,

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle_t = (-i\omega - \kappa)\langle a \rangle_t - ig\langle a\sigma_- \rangle_t \quad (6.96)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_- \rangle_t = (-i\omega - \gamma)\langle \sigma_- \rangle_t + ig\langle \sigma_z a \rangle_t \quad (6.97)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_z \rangle_t = R(z_0 - \langle \sigma_z \rangle_t) - 2ig\left(\langle \sigma_+ a \rangle_t - \langle \sigma_- a^\dagger \rangle_t\right). \quad (6.98)$$

Da dieses Gleichungssystem nicht schließt, müssen im Prinzip immer weitere neue Gleichungen für Erwartungswerte von kombinierten Observablen wie $\langle \sigma_z a \rangle_t$ aufgestellt werden, die wieder neue Observablen nach sich ziehen usw. Diese Hierarchie von Bewegungsgleichungen wir deshalb wieder im Molekularfeld-Manier durch *Faktorisierung* entkoppelt, d.h. wir ersetzen

$$\langle \sigma_z a \rangle_t \rightarrow \langle \sigma_z \rangle_t \langle a \rangle_t \quad (6.99)$$

etc., wodurch die Gleichungen entkoppeln, aber nichtlinear werden. Weiterhin transformieren wir eine 'triviale' Zeitabhängigkeit weg (NACHRECHNEN),

$$\langle a \rangle_t \equiv a(t)e^{-i\omega t}, \quad \text{Feldamplitude} \quad (6.100)$$

$$\langle \sigma_- \rangle_t = s(t)e^{-i\omega t}, \quad \text{Polarisation} \quad (6.101)$$

$$\langle \sigma_z \rangle_t = z(t), \quad \text{Inversion} , \quad (6.102)$$

was dann zu

$$\dot{a}(t) = -\kappa a(t) - igs(t) \quad (6.103)$$

$$\dot{s}(t) = -\gamma s(t) + iga(t)z(t) \quad (6.104)$$

$$\dot{z}(t) = R(z_0 - z(t)) - 2ig(s^*(t)a(t) - s(t)a^*(t)) \quad (6.105)$$

führt. Da $a(t)$ und $s(t)$ komplex sind, haben wir also ein gekoppeltes System von fünf reellen Gleichungen. Die drei physikalischen Größen Feldamplitude, Polarisation und Inversion sind zentral für die Lasertheorie in unserem ‘Heisenberg-Bild’-Zugang (der komplementär zu dem ‘Schrödinger-Bild’-Zugang mit seiner Mastergleichung ist).

Zur Analyse benutzen wir jetzt eine adiabatische Näherung, die durch sehr unterschiedliche Zeitskalen in Gl. (6.103) motiviert wird (HAKEN, ‘Licht und Materie II’). Zunächst sei

$$\kappa \ll \gamma \quad (6.106)$$

vorausgesetzt, d.h. die Feldamplitude der Kavität relaxiert durch Photonenemission viel langsamer als die Polarisation der Atome.

SCHRITT 1: $a(t)$ wird deshalb als konstant in der $s(t)$ -Gleichung angenommen. Weiterhin wird für die Inversion der ‘Startwert’ z_0 angenommen, der in der späteren Iteration noch verbessert wird. Dann folgt als Lösung für die Polarisation auf Zeitskalen $t \gg \gamma^{-1}$

$$s(t) = e^{-\gamma t} s(0) + \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) iga z \rightarrow \frac{igaz}{\gamma}, \quad t \gg \gamma^{-1}. \quad (6.107)$$

Wir interpretieren das so, dass auch für langsam veränderliches $a(t)$, $z(t)$

$$s(t) \approx \frac{iga(t)z(t)}{\gamma}, \quad \text{Versklavungs-Prinzip (1)}, \quad (6.108)$$

d.h. die Polarisation $s(t)$ folgt der Feldamplitude $a(t)$ (und der Inversion $z(t)$). Dieser Zusammenhang wird von HAKEN als *Versklavungs-Prinzip* bezeichnet und spielt auch in vielen anderen Systemen eine große Rolle.

SCHRITT 2: Das genäherte $s(t) \approx \frac{iga(t)z(t)}{\gamma}$ wird in die Inversionsgleichung eingesetzt, um eine verbesserte Iterationslösung für $z(t)$ zu erhalten. Wiederum betrachten wir Zeiten $t \gg R^{-1}$, so dass wiederum die Ableitung \dot{z} auf der linken Seite vernachlässigt werden kann,

$$z(t) \approx z_0 - \frac{4g^2}{R\gamma} z_0 |a(t)|^2, \quad \text{Versklavungs-Prinzip (2)}, \quad (6.109)$$

wobei jetzt die Inversion von der Feldamplitude ‘versklavt ist’, d.h. ihr adiabatisch folgt.

SCHRITT 3: Das versklavte $z(t)$ wird nun als neuer ‘Master’ in das versklavte $s(t)$ eingesetzt,

$$s(t) \approx \frac{iga(t)}{\gamma} \left[z_0 - \frac{4g^2}{R\gamma} z_0 |a(t)|^2 \right], \quad \text{Versklavungs-Prinzip (3)}, \quad (6.110)$$

was jetzt seinerseits den Kreis durch Einsetzen in die Gleichung für die Feldamplitude schliesst,

$$\dot{a}(t) = \left(-\kappa + \frac{g^2 z_0}{\gamma} \right) a(t) - \frac{4g^4 z_0}{R\gamma^2} |a(t)|^2 a(t), \quad \text{Laser-Selbstkonsistenzgleichung.} \quad (6.111)$$

Das ist nun in der Tat eine sehr interessante Gleichung: sie entspricht nämlich einer dynamischen Bewegungsgleichung der Variable $a(t)$ in dem aus der Mean-field-Theorie der Phasenübergänge zweiter Ordnung bekannten Mean-field-Potential

$$V(a) = -\frac{-\kappa + \frac{g^2 z_0}{\gamma}}{2} a^2 + \frac{g^4 z_0}{R\gamma^2} a^4. \quad (6.112)$$

Der kritische Punkt wird durch das Verschwinden des quadratischen Terms definiert, also

$$\frac{g^2 z_0}{\gamma} = \kappa, \quad (6.113)$$

was wieder analog zur Laserschwelle ist, die wir aus den Mastergleichungsmethoden gewonnen haben.