

Zeitliche Entwicklung der elektronischen Wellenfunktionen in einem elektrischen Kontakt

Diplomarbeit
von
Boris Schäfer

Institut für Theorie der Kondensierten Materie
Universität Karlsruhe

August 1993

Referent: Prof. Dr. A. Schmid
Korreferent: Prof. Dr. G. Schön

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	6
1.1	Problemstellung	6
1.2	Gliederung	6
2	Modelle für einen Kontakt	7
2.1	Grundsätzliches	7
2.2	Vorstellung der verwandten Modelle	8
3	Eigenzustände	11
3.1	Modell ohne Unordnung	11
3.2	Modell ohne ausgezeichnete Stelle = Modell 1	13
3.3	Modell mit ausgezeichneter Stelle = Modell 2	17
4	Orthonormalität und Vollständigkeit	24
4.1	Orthonormalität	24
4.2	Vollständigkeit	29
4.3	Zusammenfassung	37
5	Zeitliche Entwicklung	39
5.1	Der Zeitentwicklungsoperator	39
5.2	Anwendung auf einen Energieeigenzustand	40
5.3	Der Wahrscheinlichkeitsstrom	41
6	Berechnung des Stromes	43
6.1	Bestimmung der Komponenten	44
6.2	Zerlegung von $I_s(k, k', t)$	47
6.3	Zerlegung von $\varrho_{2,0,1}(k, t)$	48
6.4	Zusammenhang mit dem Residuensatz	49
6.5	Ausführen der \mathbf{k}'' -Integration	51
6.6	Ausführen der k' -Integration	55
6.7	Abschätzungen	58
6.8	Besetzungswahrscheinlichkeiten und Ströme pro Zustand	63

7	Diskussion verschiedener Fälle	67
7.1	Gesamtstrom und $-$ besetzung	67
7.2	Stromberechnung im Modell 1	69
7.3	Gebundene Zustände im Modell 2	71
7.4	Rein ausgedehnte Zustände im Modell 2	73
7.5	Zusammenfassung	77
7.6	Ausblick	78
A	Exponentialreihen	79
A.1	Berechnung mit Fourierreihen	79
A.2	Konvergenzerzeugende Faktoren	80
B	Ergänzungen zur Vollständigkeit	83
B.1	Partialbruchzerlegungen	83
B.2	Berechnung des Wegintegrals	87
B.3	Der Spezialfall $\tau = 0$	90
C	Ergänzungen zur Stromberechnung	91
C.1	Berechnung der X-Matrizen	91
C.2	Residuensatz	93
C.3	Strom für Blochzustände	94
C.4	Abschätzungen	94

Abbildungsverzeichnis

2.1	Lineare Kette mit äquidistanten Aufenthaltsplätzen.	7
2.2	Lokale Energien und Transfer im Modell ohne Unordnung.	8
2.3	Lokale Energien und Transfer in Modell 1.	9
2.4	Lokale Energien und Transfer in Modell 2.	9
3.1	Zu unterscheidende Fälle in Modell 1	14
3.2	Transmissionskoeffizient in Modell 1	16
3.3	Zu unterscheidende Fälle in Modell 2	18
3.4	Transmissionskoeffizient in Modell 2 für $\lambda = 0$	20
3.5	Transmissionskoeffizient in Modell 2 für $\lambda = 1.2$	21
4.1	Zusätzliche Eigenzustände in Modell 2	38
5.1	Wahrscheinlichkeitsstrom durch eine lineare Kette	41
6.1	Ströme über die Kontakte	66
7.1	Wahrscheinlichkeitsstrom in beiden Modellen	72
7.2	Potentialunabhängiger Strom im Modell 2	74
7.3	Besetzungswahrscheinlichkeit im Resonanzfall	77
7.4	Modell 1 bei anliegender Spannung U	78
7.5	Befüllung der Reservoirs	78
B.1	Abbildung des Gebiets \tilde{G} durch die Exponentialfunktion	87

Bezeichnungen

In dieser Arbeit werden die folgenden Bezeichnungen und Symbole häufig benutzt:

Indizes

s	Modell s
$T = L, R$	Linkes, rechtes Reservoir
j, l	j, l -ter Platz; j, l -ter Summand
i	fortlaufende Numerierung

Hochgestellte Zeichen

*	Komplexbijugation
T	Transposition

In den Argumenten

a	Abstand benachbarter Gitterplätze
$r_l = l \cdot a$	Ort eines Gitterplatzes
k	Quantenzahl
ϵ_j	Lokale Energie des Hamiltonoperators; kleine Zahl
V, V_j	Transfer-Element des Hamiltonoperators
$E, E(k)$	Energieeigenwerte
$\tau = \frac{V_{0,(-1)}}{V}$	Quotient aus den Transfers an der Kontaktstelle und im Reservoir
$\lambda = \frac{\epsilon_0}{2V}$	Quotient aus lokaler Energie des Platzes $j = 0$ und halber Energiebandbreite
t	Zeit
T	Temperatur
μ	Chemisches Potential

Mathematische Bezeichnungen

\Re, \Im	Realteil, Imaginärteil
i	Imaginäre Einheit
\mathcal{N}	Menge der natürlichen Zahlen
\mathcal{Z}	Menge der ganzen Zahlen
\mathcal{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathcal{C}	Menge der komplexen Zahlen
$\theta(x)$	Stufenfunktion
$\delta(x)$	Diracsche δ -Funktion
M_i, X_i	Matrizen
$\vec{S}(k, \epsilon), \vec{U}_i$	Spaltenvektoren
$N, N_{g,j,\beta}(\tau, (\lambda))$	Normierungskonstanten
$S(k, \epsilon) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{i(ka+i\epsilon)j}$	Geometrische Reihe einer Exponentialfunktion
$\gamma_{(s,i)}, \Upsilon$	Wege in der komplexen Ebene
$H_i(k)$	Zeitlich konstante Funktion

Zustände

$ r_j\rangle$	Basiszustand des Ortszustandsraumes
$ k\rangle, k, \tau\rangle_s$	Energieeigenzustände
$ \Psi(k, t)\rangle_s$	Zeitliche Entwicklung des Zustands $ k, 0\rangle_s$

Operatoren

$\hat{H}, \hat{H}_s(\tau, (\epsilon_0))$	Hamiltonoperator
$\hat{U}(t, t')$	Zeitentwicklungsoperator

Sonstige Bezeichnungen

\hbar	Plancksche Konstante
$c_{j,s}(k, \tau)$	Wellenfunktion
$A_{sT}(k, \tau), B_{sT}(k, \tau)$	Koeffizienten in der Wellenfunktion
$T_s(k, \tau), \tilde{T}_s(E, \tau)$	Transmissionskoeffizienten
$h_{s,B}(\tau, (\epsilon_0))$	Halbwertsbreite der Resonanzkurve
$\rho_s(r_l, k, t) = \langle r_l \Psi(k, t) \rangle_s ^2$	Wahrscheinlichkeit pro Zustand
$j_s(r_l, k, t)$	Wahrscheinlichkeitsstrom pro Zustand
$\varrho_{s,T,i}(k, t)$	i -ter Anteil der Wahrscheinlichkeit pro Zustand im Reservoir $T = L, R$
$\varrho_{2,0,j}(k, t)$	Bestandteil von $\rho_2(0, k, t)$
$n_2(r_l, t, T)$	Besetzungswahrscheinlichkeit
$I_s(r_l, t, T)$	Wahrscheinlichkeitsstrom
$f(E, T)$	Fermifunktion

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Problemstellung

Aufgrund der verbesserten Möglichkeiten, mesoskopische Systeme – wie zum Beispiel Quantenpunktkontakte – herzustellen, werden die Transporteigenschaften solcher Systeme mit großem Interesse untersucht. Davon zeugen Arbeiten (z. B. [1, 2, 3, 4]), die sich mit linearen Ketten mit einer Coulomb–Wechselwirkung an einer Stelle befassen. Auch der Spezialfall eines nicht wechselwirkenden Systems wird dort angesprochen.

In dieser Arbeit wird ein solches nicht wechselwirkendes System betrachtet. Präziser formuliert soll die zeitliche Entwicklung eines sich nicht im Gleichgewicht befindenden eindimensionalen Systems untersucht werden. Das Gleichgewicht wird dadurch gestört, daß der Kontakt geschlossen wird und somit zwei Reservoirs mit unterschiedlichen elektrochemischen Potentialen verbunden werden. Die Anordnung sei so dimensioniert, daß das System für große Zeiten nicht ins Gleichgewicht relaxiert, sondern sich ein stationärer Strom einstellt.

Dabei wird folgendermaßen vorgegangen:

Zunächst wird das System prepariert und die Störung des Gleichgewichts definiert. Danach wird die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion und daraus die Besetzung einer Stelle und der über den Kontakt fließende Strom für große Zeiten ermittelt.

1.2 Gliederung

Die Arbeit ist in drei Abschnitte gegliedert:

1. Der zeitunabhängige Teil umfaßt die Kapitel 2–4. Neben der Systempreparation werden hier Eigenzustände berechnet, Orthogonalität und Vollständigkeit nachgewiesen.
2. Der zeitabhängige Teil umfaßt die Kapitel 5–7. Aus der zeitabhängigen Wellenfunktion werden zuerst relative Besetzungswahrscheinlichkeiten pro Eigenzustand berechnet, um anschließend die Besetzung und durch zeitliche Ableitung den Strom über die Kontaktstelle zu ermitteln.
3. Die Anhänge A–C enthalten zum einen Probleme rein mathematischer Natur, zum anderen ausführliche, ergänzende Berechnungen.

Kapitel 2

Modelle für einen Kontakt

In diesem Kapitel werden zwei quantenmechanische Modelle eines elektrischen Kontakts vorgestellt.

2.1 Grundsätzliches

Der Kontakt verbindet zwei Reservoirs. Die Reservoirs werden beschrieben durch eine Kette von äquidistanten Aufenthaltsplätzen, die sich jeweils über einen Halbraum erstrecken. Der Abstand zwischen zwei benachbarten Aufenthaltsplätzen beträgt a , die Stellen sind durchnummeriert.

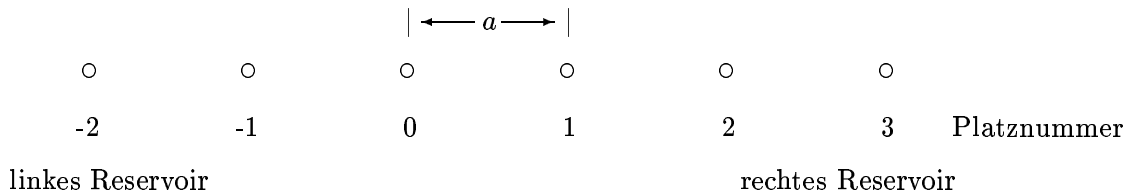


Abbildung 2.1: Lineare Kette mit äquidistanten Aufenthaltsplätzen.

Der Zustand, welcher klassisch dem eines Elektrons entspricht, das sich am j -ten Platz befindet, wird quantenmechanisch durch den Zustandsvektor $|r_j\rangle$ beschrieben:

$$\hat{r} |r_j\rangle = r_j |r_j\rangle = a j |r_j\rangle. \quad (2.1)$$

In dem so eingeführten Ortszustandsraum $\mathcal{E} = \{|\nabla_l\rangle, | \in \mathcal{Z}\}$ gelten die folgenden Beziehungen:

$$\langle r_l | r_j \rangle = \delta_{lj}, \quad (2.2)$$

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |r_j\rangle \langle r_j| = \hat{I}_{\mathcal{E}}. \quad (2.3)$$

Treten keine Kopplungen zwischen den Plätzen auf, so lautet der Hamiltonoperator \hat{H}_{oK} (oK = ohne Kopplung) des Systems:

$$\hat{H}_{oK} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \epsilon_j |r_j\rangle \langle r_j|, \quad (2.4)$$

ϵ_j ist dabei die Energie, die ein Elektron besitzt, wenn es an der Stelle j lokalisiert ist.

Im weiteren erfülle das System die folgenden Voraussetzungen:

- Die Elektronen seien so stark an die Plätze gebunden, daß nur benachbarte Stellen aneinander gekoppelt sind.
- Es finden keine Wechselwirkungen statt, daher bleiben wir bei den folgenden Betrachtungen im Einteilchenzustandsraum.
- Das System sei konservativ, d. h. der Hamiltonoperator hängt nicht explizit von der Zeit ab.
- Der Spin eines Elektrons ändert sich nicht.

Beachtet man den Spin und erweitert deshalb den Zustandsraum wie folgt:

$$\mathcal{E}_{\uparrow} = \mathcal{E} \otimes \mathcal{S}, \quad (2.5)$$

so gilt für spinerhaltende Operatoren auf \mathcal{E}_{\uparrow} :

$$\hat{H}_z = \hat{H} \otimes \hat{I}_s. \quad (2.6)$$

Dabei ist \mathcal{S} der Spinzustandsraum mit der Standardbasis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Die Beachtung des Spins beim Eigenwertproblem $\hat{H}_z|\psi\rangle_z = E|\psi\rangle_z$ bringt gegenüber dem Eigenwertproblem $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ die doppelte Entartung der Energieeigenwerte.

Deshalb wird im oben eingeführten Ortszustandsraum \mathcal{E} "spinfrei" gerechnet.

Damit läßt sich der Hamiltonoperator für so ein System allgemein wie folgt darstellen [5]:

$$\hat{H} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \epsilon_j |r_j\rangle\langle r_j| + V_j (|r_j\rangle\langle r_{j+1}| + |r_{j+1}\rangle\langle r_j|), \quad (2.7)$$

V_j bezeichnet die Amplitude des Transfers von der j -ten zur $(j+1)$ -ten Stelle. ϵ_j und V_j sind reell. Die Reellwertigkeit von V_j folgt aus dem Nichtvorhandensein von elektromagnetischen Feldern.

In dieser Diplomarbeit werden die nachfolgenden Spezialisierungen des allgemeinen Hamiltonoperators \hat{H} genauer betrachtet.

2.2 Vorstellung der verwandten Modelle

2.2.1 Modell ohne Unordnung

Das einfachste Modell besteht aus einer translationsinvarianten linearen Kette.

0	0	0	0	0	0	lokale Energie
	V	V	V	V	V	Transfer
○	○	○	○	○	○	
-2	-1	0	1	2	3	Platznummer

Abbildung 2.2: Lokale Energien und Transfer im Modell ohne Unordnung.

Hierbei gilt:

$$\epsilon_j = 0, V_j = V, \forall j \in \mathcal{Z}. \quad (2.8)$$

Die beiden Reservoirre sind zu einem verschmolzen.

2.2.2 Modell ohne ausgezeichnete Kontaktstelle = Modell 1

Im nächsten Modell trennt ein veränderter Transfer zwischen zwei Stellen die beiden Reservoirre voneinander.

0	0	0	0	0	0	lokale Energie
	V	V	τV	V	V	Transfer
○	○	○	○	○	○	
-2	-1	0	1	2	3	Platznummer

Abbildung 2.3: Lokale Energien und Transfer in Modell 1.

Hier gilt:
$$\epsilon_j = 0, V_j = V(1 - \delta_{0j}(1 - \tau)), \forall j \in \mathcal{Z}. \quad (2.9)$$

Das bedeutet beispielsweise:

- für $\tau = 0$ sind die Stellen 0 und 1 ohne Kopplung, d. h. es liegen zwei separate Reservoirre vor.
- für $\tau = 1$ sind die Stellen 0 und 1 durch eine vollständige Kopplung verbunden und somit geht in diesem Fall Modell 1 ins Modell ohne Unordnung über.

2.2.3 Modell mit einer ausgezeichneten Kontaktstelle = Modell 2

Demgegenüber befindet sich bei diesem Modell zwischen den beiden Reservoirren eine ausgezeichnete Stelle 0, deren Energie sich von den anderen lokalen Energien unterscheidet. Dieser Aufenthaltsplatz ist wiederum mit einem veränderten Transfer an die Reservoirre gekoppelt.

0	0	ϵ_0	0	0	0	lokale Energie
	V	τV	τV	V	V	Transfer
○	○	○	○	○	○	
-2	-1	0	1	2	3	Platznummer

Abbildung 2.4: Lokale Energien und Transfer in Modell 2.

Es gilt:
$$\epsilon_j = \delta_{j0}, V_j = V(1 - (\delta_{0j} + \delta_{-1j})(1 - \tau)), \forall j \in \mathcal{Z}. \quad (2.10)$$

Das bedeutet an dieser Stelle:

- für $\tau = 0$ sind rechtes und linkes Reservoir von der Stelle mit der Platznummer $j = 0$ völlig entkoppelt.
- für $\tau = 1$ sind alle Stellen durch eine vollständige Kopplung verbunden und Modell 2 unterscheidet sich vom Modell ohne Unordnung durch die veränderte lokale Energie an der Stelle $j = 0$.

Im weiteren soll $V > 0$ sein.

Kapitel 3

Eigenzustände

In diesem Kapitel werden die Eigenzustände der in Abschnitt 2.2 vorgestellten Modelle berechnet.

Dazu wird zunächst der Zustand $|k\rangle$ in Ortsdarstellung angegeben:

$$|k\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j |r_j\rangle \quad c_j = \langle r_j | k \rangle. \quad (3.1)$$

Das Eigenwertproblem

$$\hat{H} |k\rangle = E |k\rangle \quad (3.2)$$

führt nach Einsetzen von \hat{H} gemäß Gl. (2.7) und obigem $|k\rangle$ und Verwenden der Orthonormalitätsrelation (2.2) zu den folgenden Gleichungen:

$$(E - \epsilon_j) c_j = V_j c_{j+1} + V_{j-1} c_{j-1}, \quad \forall j \in \mathcal{Z}. \quad (3.3)$$

Das Ziel ist nun, diese unendlich vielen Gleichungen mit Hilfe eines Ansatzes für die verschiedenen Modelle zu lösen.

3.1 Modell ohne Unordnung

Da der Hamiltonoperator in diesem Modell periodisch ist, sind, nach dem Blochschen Theorem, die zugehörigen Eigenzustände Blochzustände [5, 6].

Man gelangt zum folgenden Ansatz:

$$c_j(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikaj} = \langle r_j | k \rangle, \quad (3.4)$$

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikaj} |r_j\rangle. \quad (3.5)$$

Einsetzen von (2.8) und (3.4) in (3.3) liefert:

$$E e^{ikaj} = V e^{ikaj} (e^{ika} + e^{-ika}) \Leftrightarrow E = 2V \cos ka = E(k); \quad (3.6)$$

$|k\rangle$ ist $\frac{2\pi}{a}$ -periodisch, und deshalb ist eine Einschränkung von k auf die 1. Brillouin-Zone, d. h. $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ nötig.

Die Eigenwerte sind mit Ausnahme von $k = 0$ und $k = \frac{\pi}{a}$ zweifach entartet.

Es muß noch nachgewiesen werden, daß die oben eingeführten Zustandsvektoren $|k\rangle$, $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden.

3.1.1 Orthonormalität

Aus (3.5) folgt:

$$\langle k' | k \rangle = N^{-1} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')aj}.$$

Die dabei auftretende Summe wird mit Diracschen δ -Funktionen in Verbindung gebracht:

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')aj} = \frac{2\pi}{a} \delta(k - k'). \quad (3.7)$$

Im Anhang A werden die Gleichungen eingehender betrachtet. Mit der Normierungskonstante $N = \frac{2\pi}{a}$ sind die Zustände $|k\rangle, |k'\rangle$ zueinander orthonormal.

3.1.2 Vollständigkeit

Zunächst wird der Hilfsoperator \hat{G} eingeführt:

$$\hat{G} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a} + \varepsilon}^{\frac{\pi}{a}} dk |k\rangle \langle k| = N^{-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a} + \varepsilon}^{\frac{\pi}{a}} dk \left(\sum_{j,l=-\infty}^{\infty} e^{ika(j-l)} |r_j\rangle \langle r_l| \right).$$

Durch Vertauschen von uneigentlicher Integration und Summation erhält man:

$$\begin{aligned} \hat{G} &= N^{-1} \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a} + \varepsilon}^{\frac{\pi}{a}} dk e^{ika(j-l)} \right) |r_j\rangle \langle r_l| \quad \Leftrightarrow \quad (3.8) \\ \hat{G} &= \frac{a}{2\pi} \left(\sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{2\pi}{a} |r_j\rangle \langle r_j| + \sum_{j \neq l} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [ia(j-l)^{-1} (e^{i\pi(j-l)} - e^{i(j-l)(\varepsilon a - \pi)})] |r_j\rangle \langle r_j| \right) = \hat{I}_{\mathcal{E}}. \end{aligned}$$

Somit gilt:

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} V[|r_{j+1}\rangle \langle r_j| + |r_j\rangle \langle r_{j+1}|] = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk E(k) |k\rangle \langle k|, \quad (3.9)$$

wobei das Integral als uneigentlich an der unteren Grenze anzusehen ist und $E(k)$ gemäß (3.6) und $|k\rangle$ gemäß (3.5) zu wählen sind.

Die bei den anderen Modellen auftretende uneigentliche Integrale werden nicht wie oben explizit ausgeschrieben. Man bedenke aber, daß durch $\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk f(k)$ ein uneigentliches Integral gemeint sein kann (ablesbar am Definitionsbereich von $|k\rangle$).

Gleichung (3.4) impliziert, daß es sich bei der Wellenfunktion $c_j(k)$ um eine frei propagierende ebene Welle handelt, also die Propagation eines freien Teilchens beschrieben wird. Ein von links einlaufendes Teilchen ist durch k -Werte mit $0 < k < \frac{\pi}{a}$, ein von rechts einlaufendes Teilchen durch k -Werte mit $-\frac{\pi}{a} < k < 0$ gekennzeichnet. Die Zustände mit $k = 0$ und $k = \frac{\pi}{a}$ sind als "Grenzzustände" zu gebundenen Zustände anzusehen. Hierbei handelt es sich eigentlich um stehende Wellen. Im Modell mit einer ausgezeichneten Stelle können sie sich bei geeignetem τ und ϵ_0 in gebundene Zustände verwandeln (gekennzeichnet durch komplexes k).

Dieses Modell eignet sich damit nur, um einen "pathologischen" Kontakt zu beschreiben. Es simuliert hingegen ein Reservoir sehr gut: Das Elektron kann, ohne einen Widerstand zu spüren, frei propagieren.

Das Modell wird an dieser Stelle nicht näher untersucht. Seine Aufgabe bestand darin, uns, aufgrund seiner Einfachheit, zur Problemstellung hinzuführen. Natürlich findet es, da es ein Spezialfall der anderen Modelle ist ($\tau = 1$, $\epsilon_0 = 0$), auch noch später Eingang in diese Arbeit.

3.2 Modell ohne ausgezeichnete Stelle = Modell 1

Gegenüber dem Modell ohne Unordnung gibt es hier eine ausgezeichnete Verbindung zwischen zwei Stellen. Ist der Transfer dieser Verbindung sehr viel kleiner als die Transfers der anderen Verbindungen, d. h. $|\tau| \ll 1$, so wird eine Potentialbarriere simuliert [4]. Der Hamiltonoperator lautet:

$$\hat{H}_1(\tau) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} V (1 - \delta_{0j}(1 - \tau)) (|r_{j+1}\rangle\langle r_j| + |r_j\rangle\langle r_{j+1}|). \quad (3.10)$$

Zieht man das im letzten Abschnitt Erwähnte in Betracht, so kann man für die Wellenfunktion zum folgenden Ansatz kommen:

Von links einlaufendes Teilchen: $0 \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} e^{ikaj} + A_{1L}(k, \tau) e^{-ikaj} & j \leq 0 \\ B_{1L}(k, \tau) e^{ikaj} & j \geq 1 \end{cases}. \quad (3.11)$$

Von rechts einlaufendes Teilchen: $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq 0$

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} B_{1R}(k, \tau) e^{ikaj} & j \leq 0 \\ e^{ikaj} + A_{1R}(k, \tau) e^{-ikaj} & j \geq 1 \end{cases}. \quad (3.12)$$

Die Grenzzustände mit $k = 0$, $k = \pm\frac{\pi}{a}$ werden einbezogen und später gesondert betrachtet.

Einsetzen von (2.9), (3.11) und (3.12) in (3.3) liefert die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} (E - 2V \cos ka) c_j(k, \tau) &= 0 \quad \forall j \in \mathcal{Z} \setminus \{l, \infty\} \\ E(1 + A_{1L}(k, \tau)) &= V [\tau B_{1L}(k, \tau) e^{ika} + e^{-ika} + A_{1L}(k, \tau) e^{ika}] \quad j = 0 \\ E B_{1L}(k, \tau) e^{ika} &= V [\tau(1 + A_{1L}(k, \tau)) + B_{1L}(k, \tau) e^{2ika}] \quad j = 1 \\ E B_{1R}(k, \tau) &= V [\tau(e^{ika} + A_{1R}(k, \tau) e^{-ika}) + B_{1R}(k, \tau) e^{-ika}] \quad j = 0 \\ E(e^{ika} + A_{1R}(k, \tau) e^{-ika}) &= V [\tau B_{1R}(k, \tau) + e^{2ika} + A_{1R}(k, \tau) e^{-2ika}] \quad j = 1. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Aus dem Gleichungssystem folgt:

$$\begin{aligned} E(k) &= 2V \cos ka \\ A_{1L}(k, \tau) &= \frac{(1 - \tau^2) e^{ika}}{\tau^2 e^{ika} - e^{-ika}} & B_{1L}(k, \tau) &= \tau \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{\tau^2 e^{ika} - e^{-ika}} =: B_1(k, \tau) \\ A_{1R}(k, \tau) &= \frac{(1 - \tau^2) e^{ika}}{\tau^2 e^{-ika} - e^{ika}} & B_{1R}(k, \tau) &= \tau \frac{e^{-ika} - e^{ika}}{\tau^2 e^{-ika} - e^{ika}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Man erkennt, daß die Eigenwerte nicht von τ abhängen.

3.2.1 Spezialfälle

- Der Fall $\tau = 1$ reproduziert das Modell ohne Unordnung.
- Der Fall $\tau = -1$ bringt einen Vorzeichenwechsel der Wellenfunktion an der Kontaktstelle mit sich (gegenüber dem Fall mit $\tau = 1$).

In allen weiteren Fällen ist

$$\tau^2 e^{ika} - e^{-ika} = (\tau^2 - 1) \cos ka + (1 + \tau^2) i \sin ka \neq 0 \quad \text{für reelles } \tau \text{ und } k.$$

Dort gilt: $|k\rangle = |0_{\mathcal{E}}\rangle$ für $k \in \{-\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{a}\}$, wobei $|0_{\mathcal{E}}\rangle$ das Nullelement des Hilbertraumes ist: $|0_{\mathcal{E}}\rangle = 0 |r_j\rangle, \forall j \in \mathcal{Z}$.

- Der Fall $\tau = 0$ liefert:

$$c_j(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} 2i e^{ika} \sin ka(j-1) & j \leq 0 \\ 0 & j \geq 1 \end{cases} \quad 0 < k < \frac{\pi}{a} \quad (3.15)$$

$$\begin{cases} 0 & j \leq 0 \\ 2i \sin kaj & j \geq 1 \end{cases} \quad -\frac{\pi}{a} < k < 0$$

Es liegen zwei getrennte Reservoirs vor. Bei der Betrachtung der zeitlichen Entwicklung tritt der vorliegende Fall wieder in Erscheinung.

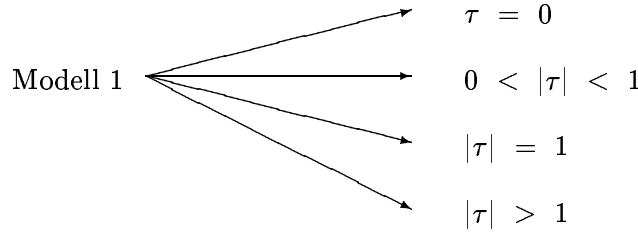


Abbildung 3.1: Zu unterscheidende Fälle in Modell 1

Die Orthogonalität und Vollständigkeit wird im anschließenden Kapitel eingehender behandelt. Zusammenfassend lassen sich die Eigenzustände für $\tau^2 \neq 1, 0 < k < \frac{\pi}{a}$ darstellen durch:

$$|k, \tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{j=-\infty}^0 (e^{ikaj} + A_{1L}(k, \tau) e^{-ikaj}) |r_j\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} B_{1L}(k, \tau) e^{ikaj} |r_j\rangle \right), \quad (3.16)$$

und für den Fall $-\frac{\pi}{a} < k < 0$ gilt:

$$|k, \tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{j=-\infty}^0 B_{1R}(k, \tau) e^{ikaj} |r_j\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} (e^{ikaj} + A_{1L}(k, \tau) e^{-ikaj}) |r_j\rangle \right). \quad (3.17)$$

mit $A_{1L}(k, \tau)$, $B_{1L}(k, \tau)$, $A_{1R}(k, \tau)$, $B_{1R}(k, \tau)$ und der Eigenwertgleichung gemäß (3.14).

3.2.2 Transmissionskoeffizient ($\tau \neq 1$) :

Der Transmissionskoeffizient für das System beträgt:

$$T_1(k, \tau) = |B_{1L}(k, \tau)|^2 = |B_{1R}(k, \tau)|^2 = \frac{4\tau^2 \sin^2 ka}{\tau^4 - 2\tau^2 \cos 2ka + 1} = \frac{4\tau^2 \sin^2 ka}{(1 - \tau^2)^2 + 4\tau^2 \sin^2 ka}. \quad (3.18)$$

Bei Betrachtung des Reflexionskoeffizienten

$$R_1(k, \tau) = |A_{1L}(k, \tau)|^2 = |A_{1R}(k, \tau)|^2 = \frac{(1 - \tau^2)^2}{(1 - \tau^2)^2 + 4\tau^2 \sin^2 ka}, \quad (3.19)$$

erkennt man die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit: $T_1(k, \tau) + R_1(k, \tau) = 1$.

Möchte man den Transmissionskoeffizienten als eine von der Teilchenenergie abhängige Funktion angeben, so erhält man:

$$\tilde{T}_1(E(k), \tau) = T_1(k, \tau) = \frac{4\tau^2 V^2 (1 - \cos^2 ka)}{V^2 (1 - \tau^2)^2 + 4\tau^2 V^2 (1 - \cos^2 ka)} = \frac{\tau^2 (4V^2 - E^2)}{V^2 (1 + \tau^2)^2 - \tau^2 E^2}. \quad (3.20)$$

T wird bei festem τ gemäß

$$T_1(k, \tau) = 1 - R_1(k, \tau) = 1 - \frac{(1 - \tau^2)^2}{(1 - \tau^2)^2 + 4\tau^2 \sin^2 ka}$$

maximal für $k = \pm \frac{\pi}{2a}$:

$$T_{1,max} = \tilde{T}_1(0, \tau) = \frac{4\tau^2}{(1 + \tau^2)^2}. \quad (3.21)$$

Wir haben also für $E = 0$ eine Resonanz gefunden. Gesucht sei nun die Halbwertsbreite der Resonanzkurve:

$$\frac{T_{1,max}}{2} = \frac{2\tau^2}{(1 + \tau^2)^2} = \tilde{T}_1(E_H, \tau) \Leftrightarrow E_H = \pm V (1 + \tau^2) \sqrt{\frac{2}{\tau^4 + 1}}.$$

Die Halbwertsbreite der Resonanzkurve beträgt:

$$h_{1,B}(\tau) = 2V (1 + \tau^2) \sqrt{\frac{2}{\tau^4 + 1}} \geq 2V \sqrt{2}. \quad (3.22)$$

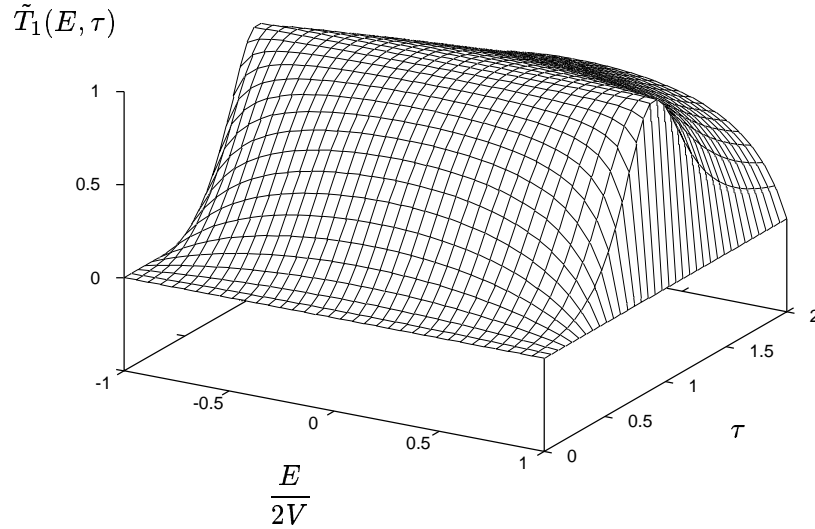
Das Maximum der Resonanzkurve ist also in diesem Modell nicht stark ausgeprägt.

Man beachte dazu auch Abbildung 3.2.

3.2.3 Gebundene Zustände

Die Frage ist nun, ob wir alle Zustände erfaßt haben. Neben den zuvor diskutierten ausgedehnten Zuständen könnten auch noch gebundene Zustände eine Rolle spielen. Man findet sie als Polstellen der Wellenfunktionen der propagierenden Zustände [8]. Weil keine Divergenzen auftreten sollen, werden sie durch k -Werte mit positivem Imaginärteil repräsentiert. Die Symmetrie der Anordnung führt dann zum folgenden Ansatz:

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\{ \begin{array}{ll} e^{ika_j} & j \geq 1 \\ \beta e^{ika(1-j)} & j \leq 0 \end{array} \right\} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ika|j|} [\theta(j) + \beta e^{ika} \theta(1-j)]. \quad (3.23)$$

Abbildung 3.2: Transmissionskoeffizient in Abhängigkeit von der Energie und von τ .

dabei sei die θ -Funktion wie untenstehend definiert:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} .$$

Einsetzen von (2.9) und (3.23) in (3.3) ergibt:

$$\begin{aligned} (E - 2V \cos ka) c_j(k, \tau) &= 0 & \forall j \in \mathcal{Z} \setminus \{1, \infty\} \\ \beta E &= \tau V + \beta V e^{ika} & j = 0 \\ E &= V e^{ika} + \beta \tau V & j = 1 \end{aligned} . \quad (3.24)$$

Durch Umformungen erhält man:

$$\begin{aligned} E(k) &= 2V \cos ka \\ \beta^2 &= 1 \\ \beta &= \tau e^{ika} . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Aus der Gleichung für $j = 0$ kann man mit Hilfe von

$$k = k_r + ik_i, \quad k_i > 0, \quad -\frac{\pi}{a} < k_r \leq \frac{\pi}{a}$$

die folgenden Gleichungen

$$\begin{aligned} \beta &= \tau \cos k_r a e^{-k_i a} \\ 0 &= \tau \sin k_r a e^{-k_i a} \quad \text{ableiten.} \end{aligned}$$

Unter den oben angegebenen Bedingungen gibt es vier Lösungen.

1. Fall: $\beta = 1$

- 1. Lösung: $k_r = 0$ $e^{k_i a} = \tau$ falls $\tau > 1$
- 2. Lösung: $k_r = \frac{\pi}{a}$ $e^{k_i a} = -\tau$ falls $\tau < -1$.

2. Fall: $\beta = -1$

- 3. Lösung: $k_r = 0$ $e^{k_i a} = -\tau$ falls $\tau < -1$
- 4. Lösung: $k_r = \frac{\pi}{a}$ $e^{k_i a} = \tau$ falls $\tau > 1$.

Also gibt es für $\tau^2 > 1$ zwei lokalisierte Eigenzustände $|k^{(\beta)}, \tau\rangle$ mit den Koeffizienten gemäß (3.23), wobei

$$\begin{aligned} \text{für } \tau > 1 & : k^{(\beta)} a = \frac{\pi}{2} (1 - \beta) + i \ln \tau \\ \text{und für } \tau < -1 & : k^{(\beta)} a = \frac{\pi}{2} (1 + \beta) + i \ln(-\tau) \quad \beta = \pm 1, \quad \text{gilt.} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Der Energieeigenwert läßt sich aus $E(k) = 2V \cos ka$ berechnen.

3.3 Modell mit ausgezeichneter Stelle = Modell 2

Zusätzlich zu Modell 1 besitzt die Stelle $j = 0$ die lokale Energie ϵ_0 . Je nachdem welche Werte ϵ_0 und τ annehmen, simuliert der Aufenthaltsplatz $j = 0$ eine Lokalisationsstelle oder eine Resonanzregion [4].

Der Hamiltonoperator lautet wie folgt:

$$\hat{H}_2(\tau, \epsilon_0) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta_{j0} \epsilon_0 |r_j\rangle\langle r_j| + V [1 - (\delta_{0j} + \delta_{-1j})(1 - \tau)] [|r_{j+1}\rangle\langle r_j| + |r_j\rangle\langle r_{j+1}|]. \quad (3.27)$$

Nach dem oben Gesagten sind zwei Ansätze zu formulieren [8]:

3.3.1 Streuwellenansatz

Gegenüber (3.11) und (3.12) wird nun für $c_0(k, \tau)$ kein spezieller Ansatz gewählt, sondern mit Hilfe des Gleichungssystems bestimmt.

Von links einlaufendes Teilchen: $0 \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} e^{i k a j} + A_{2L}(k, \tau) e^{-i k a j} & j < 0 \\ B_{2L}(k, \tau) e^{i k a j} & j > 0 \end{cases} . \quad (3.28)$$

Von rechts einlaufendes Teilchen: $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq 0$

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} B_{2R}(k, \tau) e^{i k a j} & j < 0 \\ e^{i k a j} + A_{2R}(k, \tau) e^{-i k a j} & j > 0 \end{cases} . \quad (3.29)$$

Das Einsetzen von (2.10), (3.28) und (3.29) in (3.3) liefert für von links einlaufende Teilchen das nachstehende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} (E - 2V \cos ka) c_j(k, \tau) &= 0 \quad \forall j \in \mathcal{Z} \setminus \{-\infty, 1, \infty\} \\ E (e^{-i k a} + A_{2L}(k, \tau)) &= V [e^{-2i k a} + A_{2L}(k, \tau) e^{2i k a} + \tau \sqrt{N} c_{0,L}(k, \tau)] \quad j = -1 \\ (E - \epsilon_0) \sqrt{N} c_{0,L}(k, \tau) &= \tau V [e^{-i k a} + A_{2L}(k, \tau) e^{i k a} + B_{2L}(k, \tau) e^{i k a}] \quad j = 0 \\ E B_{2L}(k, \tau) e^{i k a} &= V [\tau \sqrt{N} c_{0,L}(k, \tau) + B_{2L}(k, \tau) e^{2i k a}] \quad j = 1. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Durch Umformungen erhält man:

$$\begin{aligned}
 E(k) &= 2V \cos ka \\
 B_{2L}(k, \tau) &= \tau^2 \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2\lambda - (1 - 2\tau^2) e^{ika} - e^{-ika}} = \frac{i\tau^2 \sin ka}{\lambda - (1 - \tau^2) \cos ka + i\tau^2 \sin ka} \\
 A_{2L}(k, \tau) &= B_{2L}(k, \tau) - 1 \\
 c_{0,L}(k, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \tau^{-1} B_{2L}(k, \tau),
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

wobei $\lambda = \frac{\epsilon_0}{2V}$ ist. Durch analoge Betrachtungen erhält man für von rechts einlaufende Elektronen ($k \leq 0$):

$$A_{2R}(k, \tau) = A_{2L}(-k, \tau) \quad B_{2R}(k, \tau) = B_{2L}(-k, \tau) \quad c_{0,R}(k, \tau) = c_{0,L}(-k, \tau). \tag{3.32}$$

Man kann die Wellenfunktion insgesamt wie folgt angeben:

$$\begin{aligned}
 c_j(k, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\theta(-kj)(e^{ikaj} - e^{-ikaj}) + B_2(|k|, \tau) e^{ia|kj|} [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{0j}] \right), \quad \text{wobei} \\
 B_2 &= B_{2L} \quad \text{und} \quad c_0 = c_{0,L} \quad \text{gilt.}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Spezialfälle

Es treten die folgenden Spezialfälle auf:

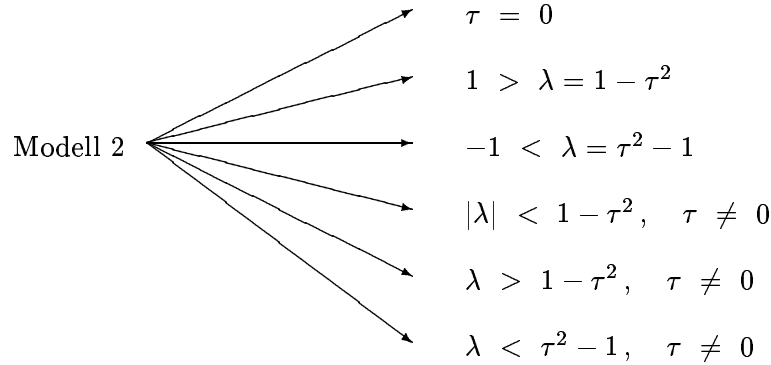


Abbildung 3.3: Zu unterscheidende Fälle in Modell 2

- Der Fall $\tau = 0$ liefert:

$$c_j(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{N}} [\theta(-kj)(e^{ikaj} - e^{-ikaj})] = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} 2i \sin kaj & j < 0 \\ 0 & j \geq 0 \end{cases} \quad 0 < k < \frac{\pi}{a} \\
 \begin{cases} 0 & j \leq 0 \\ 2i \sin kaj & j > 0 \end{cases} \quad -\frac{\pi}{a} < k < 0.
 \end{cases} \tag{3.34}$$

Zusätzlich zu zwei getrennten Reservoirien liegt hier noch eine lokalisierte Stelle vor.

Falls ϵ_0 zwischen $-2V$ und $2V$ liegt, so erhält man aus (3.30) ein beliebiges $c_0(k, \tau)$. Wir setzen zunächst wie oben $c_0(k, \tau) = 0$, was später durch den Lokalisationsansatz und die Orthogonalität gerechtfertigt wird.

In allen weiteren Fällen sei $\tau \neq 0$.

- $\lambda = 1 - \tau^2$: Für $k = 0$ existiert der Eigenzustand

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{0j}] |r_j\rangle$$

zum Eigenwert $E(0) = 2V$.

Für $k = \pm \frac{\pi}{a}$ gilt: $|\frac{\pi}{a}\rangle = |-\frac{\pi}{a}\rangle = |0_{\mathcal{E}}\rangle$.

- $\lambda = \tau^2 - 1$: Für $k = \pm \frac{\pi}{a}$ existiert der Eigenzustand

$$|\frac{\pi}{a}\rangle = |-\frac{\pi}{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} [(-1)^j - (1 - \tau^{-1}) \delta_{0j}] |r_j\rangle$$

zum Eigenwert $E(\frac{\pi}{a}) = -2V$.

Für $k = 0$ gilt: $|0\rangle = |0_{\mathcal{E}}\rangle$.

- Treffen die beiden letztgenannten Fälle gleichzeitig zu ($\lambda = 0, \tau^2 = 1$), so liegt das Modell ohne Unordnung vor (siehe Abschnitt 3.2.1).

In allen anderen Fällen weist $c_j(k, \tau)$ keine Nullstelle im Nenner auf, so daß $|k\rangle = |0_{\mathcal{E}}\rangle$ für $k \in \{-\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{a}\}$.

Transmissionskoeffizient

Die oben benannten Spezialfälle seien von der folgenden Betrachtung ausgeschlossen. Für dieses System berechnet sich der Transmissionskoeffizient zu:

$$T_2(k, \tau) = |B_2(k, \tau)|^2 = \frac{\tau^4 \sin^2 ka}{(\lambda - (1 - \tau^2) \cos ka)^2 + \tau^4 \sin^2 ka} = \Re[B_2(k, \tau)]. \quad (3.35)$$

Der Reflexionskoeffizient beträgt:

$$R_2(k, \tau) = |B_2(k, \tau) - 1|^2 = |B_2(k, \tau)|^2 - 2\Re[B_2(k, \tau)] + 1 = 1 - T_2(k, \tau), \quad (3.36)$$

also ist auch hier die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit gegeben.

Der Transmissionskoeffizient ergibt sich als eine von der Teilchenenergie abhängige Funktion zu:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2(E(k), \tau) = T_2(k, \tau) &= \frac{4\tau^4 V^2 (1 - \cos^2 ka)}{4V^2 [(\lambda - (1 - \tau^2) \cos ka)^2 + \tau^4 (1 - \cos^2 ka)]} \\ &= \frac{\tau^4 (4V^2 - E^2)}{(2V\lambda - (1 - \tau^2) E)^2 + \tau^4 (4V^2 - E^2)}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Die Diskussion der Funktion $T_2(k, \tau)$ ist im Vergleich zur Betrachtung von $T_1(k, \tau)$ schwieriger: Zum einen beinhaltet $T_2(k, \tau)$ eine weitere veränderliche Größe λ , zum anderen ist die Abhängigkeit von k komplizierter.

$$T_2(k, \tau) = 1 - R_2(k, \tau) = 1 - \frac{(\lambda - (1 - \tau^2) \cos ka)^2}{(\lambda - (1 - \tau^2) \cos ka)^2 + \tau^4 \sin^2 ka}.$$

Ist $|\lambda| < |1 - \tau^2|$, so wird T_2 maximal, falls

$$\lambda = \frac{\epsilon_0}{2V} = (1 - \tau^2) \cos ka \Leftrightarrow \epsilon_0 = (1 - \tau^2) E$$

$$T_{2,max} = \tilde{T}_2 \left(\frac{\epsilon_0}{1 - \tau^2}, \tau \right) = 1. \quad (3.38)$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{T_{2,max}}{2} &= \frac{1}{2} = \tilde{T}_2(E_H, \tau) \quad \Leftrightarrow \\ E_H &= \frac{2V}{(1 - \tau^2)^2 + \tau^4} \left(\lambda(1 - \tau^2) \pm \tau^2 \sqrt{(1 - \tau^2)^2 + \tau^4 - \lambda^2} \right). \end{aligned} \quad (3.39)$$

- Für $\tau \ll 1$ ergibt sich:

$$E_H = \epsilon_0 \pm \tau^2 \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}. \quad (3.40)$$

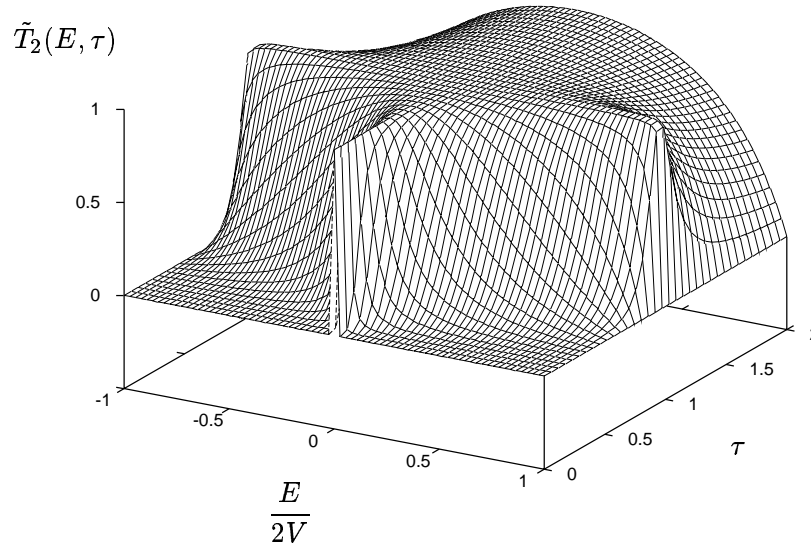


Abbildung 3.4: Transmissionskoeffizient in Abhängigkeit von der Energie und von τ für $\lambda = 0$

In den Abbildungen 3.4 und 3.5 sind Transmissionskoeffizienten über der Energie und über τ aufgetragen. Für die Halbwertsbreite der Resonanzkurve gilt:

$$h_{2,B}(\tau, \epsilon_0) = 2\tau^2 \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}, \quad (3.41)$$

damit ist die Resonanzkurve stark ausgeprägt.

Das bedeutet, daß die einlaufenden Teilchen von der Potentialbarriere total reflektiert werden, es sei denn ihre Energie liegt sehr nahe bei ϵ_0 . Man spricht im vorliegenden Fall vom Prozeß des Resonanz-Tunnelns und nennt ϵ_0 Resonanzenergie [4].

- Für $|\tau| > 1$ bleibt nach (3.39) die Halbwertsbreite immer über $2V$, und man erhält hier keine ausgeprägte Resonanzkurve.

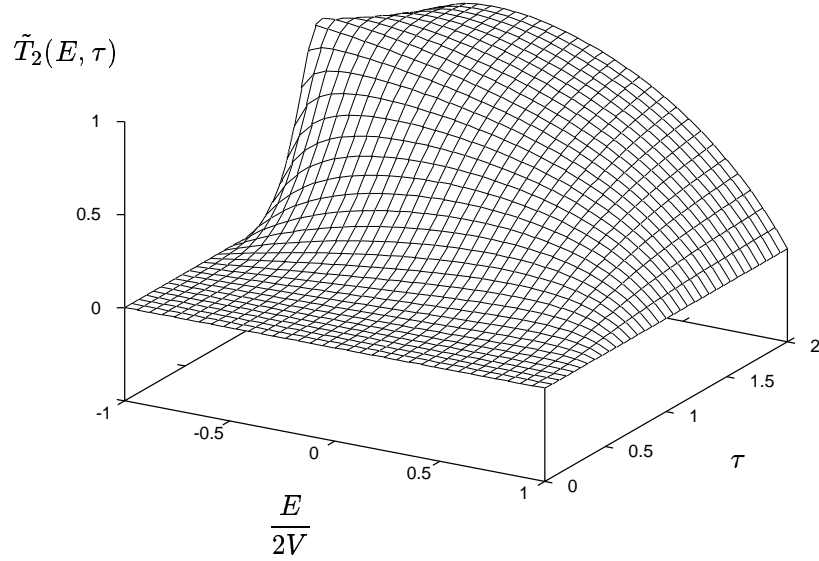


Abbildung 3.5: Transmissionskoeffizient in Abhängigkeit von der Energie und von τ für $\lambda = 1.2$

Ist $|\lambda| > |1 - \tau^2|$, so kann man durch elementare Kurvendiskussion zeigen, daß T_2 maximal wird, falls:

$$\cos ka = \frac{1 - \tau^2}{\lambda} \Leftrightarrow E = \frac{4V^2 (1 - \tau^2)}{\epsilon_0},$$

$$T_{2,max} = \tilde{T}_2 \left(\frac{4V^2 (1 - \tau^2)}{\epsilon_0}, \tau \right) = \frac{\tau^4}{\tau^4 + \lambda^2 - (1 - \tau^2)^2} = \frac{\tau^4}{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}. \quad (3.42)$$

- Für den Fall $\lambda^2 \gg (1 - \tau^2)^2$ gilt $T_{2,max} \ll 1$.

Die einlaufenden Teilchen werden total reflektiert. Dieser Prozeß ist weitgehend unabhängig von der Elektronenenergie.

3.3.2 Lokalisationsansatz

Wir nehmen an, daß ein Elektron an der Stelle $j = 0$ lokalisiert ist und die Wellenfunktion mit $|j|$ exponentiell abfällt. Es sei zunächst $\tau \neq 0$, für $c_0(k, \tau)$ wird wiederum kein spezieller Ansatz gewählt, aber es werden komplexe k -Werte mit positivem Imaginärteil zugelassen:

$$c_j(k, \tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ika|j|}, \quad j \neq 0. \quad (3.43)$$

Einsetzen von (2.10) und (3.43) in (3.3) ergibt:

$$\begin{aligned} (E - 2V \cos ka) c_j(k, \tau) &= 0 \quad \forall j \in \mathcal{Z} \setminus \{-\infty, \infty\} \\ E e^{ika} &= V [e^{2ika} + \tau \sqrt{N} c_0(k, \tau)], \quad |j| = 1 \\ (E - \epsilon_0) \sqrt{N} c_0(k, \tau) &= 2\tau V e^{ika}, \quad j = 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Umformungen führen zum folgenden Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} E(k) &= 2V \cos ka \\ c_{0,L}(k, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \tau^{-1} \\ 2\lambda &= (1 - 2\tau^2) e^{ika} + e^{-ika}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Aus der letzten dieser Gleichungen erhält man mit

$$k = k_r + ik_i, \quad k_i > 0, \quad -\frac{\pi}{a} < k_r \leq \frac{\pi}{a}$$

die Bedingung, für welche k -Werte der Ansatz gültig ist:

$$\begin{aligned} [(1 - 2\tau^2) e^{-k_i a} + e^{k_i a}] \cos k_r a &= 2\lambda \\ i [(1 - 2\tau^2) e^{-k_i a} - e^{k_i a}] \sin k_r a &= 0. \end{aligned}$$

Man unterscheidet drei Fälle:

- 1. Fall: $k_r = 0$ $e^{k_i a} = \lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}$ falls $\lambda > 1 - \tau^2$.
- 2. Fall: $k_r = \frac{\pi}{a}$ $e^{k_i a} = -\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}$ falls $\lambda < \tau^2 - 1$.
- 3. Fall: $e^{2k_i a} = (1 - 2\tau^2) \leq 1$ Widerspruch zu $k_i > 0$.

Somit erhält man, abhängig von λ und τ , höchstens zwei lokalisierte Zustände.

Der Zustand $|k, \tau\rangle$ mit

$$|k, \tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ika|j|} [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{0j}] |r_j\rangle \quad (3.46)$$

ist nur dann Eigenzustand zum Eigenwert $E(k) = 2V \cos ka$, falls

$$\begin{aligned} \text{entweder } \lambda > 1 - \tau^2, \quad ka &= i \ln[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}] \\ \text{oder } \lambda < \tau^2 - 1, \quad ka &= \pi + i \ln[-\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}] \end{aligned} \quad (3.47)$$

Spezialfall

Für den Fall $\tau = 0$ liefert obiger Lokalisationsansatz keine Lösung. Betrachtet man (2.10), so erkennt man, daß die Stelle $j = 0$ von der rechten und linken Teilkette völlig abgeschnitten ist.

Befindet sich ein Elektron mit der lokalen Energie ϵ_0 am Platz $j = 0$, so hat es keine Möglichkeit, von dort wegzukommen.

Aus diesen Überlegungen kann man die Behauptung,

$$|k := 0, \tau = 0\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta_{0j} |r_j\rangle = |r_0\rangle \quad (3.48)$$

ist Eigenzustand zum Eigenwert $E(0) = \epsilon_0$, ableiten und sie mit Hilfe von (2.10) und (3.3) beweisen.

3.3.3 Abhängigkeiten von τ und λ

Wie oben schon angedeutet worden ist, hängt das Ergebnis stark davon ab, welche Werte τ und λ annehmen.

Man erhält ein Resonanz-Tunnel-Problem, wenn $|\lambda| < 1 - \tau^2$ ist. Dort gibt es keine gebundenen Zustände (man betrachte dazu auch Abbildung 4.1 auf Seite 38).

Im Fall $|\lambda| > |1 - \tau^2|$ tritt ein gebundener Zustand auf ($|\tau| < 1$).

Im weiteren wird hauptsächlich auf die Simulation einer Potentialbarriere eingegangen. Durch einen um den Faktor $|\tau| \ll 1$ gesenkten Transfer ist der Transport über die Kontaktstelle hinweg behindert. In diesem Fall macht sich der Unterschied zwischen Modell 1 und Modell 2 bemerkbar: In Modell 1 treten nun keine gebundenen Zustände auf, in Modell 2 kann das Auftreten solcher Zustände hingegen durch entsprechend vorgegebene Werte der lokalen Energie am Platz $j = 0$ bewerkstelligt werden.

Im nächsten Kapitel wird jedoch die Orthogonalität und Vollständigkeit nicht nur für $|\tau| \ll 1$, sondern auf allgemeiner Ebene gezeigt.

Kapitel 4

Orthonormalität und Vollständigkeit

Es gilt nun zu zeigen, daß die im letzten Kapitel eingeführten Eigenzustände ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Dabei werden auch die noch unbekanntenen Normierungskonstanten bestimmt.

4.1 Orthonormalität

Da Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten zueinander orthogonal sind, genügt es, die Zustände mit gleichen Eigenwerten zu prüfen. Hieraus erhält man gleichzeitig die Normierungskonstante.

Aus diesem Grund sind die gebundenen Zustände in den meisten Fällen unproblematisch und werden an den Schluß der Betrachtung gestellt.

Die Eigenzustände kann man in den beiden Modellen wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned} |k, \tau\rangle_s &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{j,s}(k, \tau) |r_j\rangle & (4.1) \\ c_{j,s}(k, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} B_{s,T}^0(k, \tau) = [\tau^{-1} (\delta_{s1} \delta_{TL} + \delta_{s2}) + \delta_{s1} \delta_{TR}] B_s(|k|, \tau) & j = 0 \\ \theta(-kj)(e^{ikaj} + A_{s,T}(k, \tau) e^{-ikaj}) + \theta(kj) B_{s,T}(k, \tau) e^{ikaj} & j \neq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

wobei:

- $s \in \{1, 2\}$ das jeweilige Modell bezeichnet.

- $T = \begin{cases} L & \text{falls } \text{sgn } k = 1 \\ R & \text{falls } \text{sgn } k = -1 \end{cases}$

festlegt, ob ein von rechts oder von links einlaufendes Teilchen beschrieben wird.

- k -Werte mit $0 < |k| < \frac{\pi}{a}$ betrachtet werden sollen, da für $k = 0$, $k = \pm \frac{\pi}{a}$ die Energieeigenwerte sowieso nicht entartet sind.

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} {}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{j,s}^*(k', \tau) c_{j,s}(k, \tau) = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,T'}^0(k', \tau)]^* B_{s,T}^0(k, \tau) \right. \\ &+ \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[(\theta(-k'j) + \theta(k'j) B_{s,T'}^*(k', \tau)) e^{-ik'aj} + \theta(-k'j) A_{s,T'}^*(k', \tau) e^{ik'aj} \right] \\ &\times \left. \left[(\theta(-kj) + \theta(kj) B_{s,T}(k, \tau)) e^{ikaj} + \theta(-kj) A_{s,T}(k, \tau) e^{-ikaj} \right] (1 - \delta_{0j}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Indem man negative j durch $l = -j$ substituiert, erhält man:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,T'}^0(k', \tau)]^* B_{s,T}^0(k, \tau) + \sum_{j=1}^{\infty} \vec{e}_j^T(k, k') \mathbf{M}_{1,s}(k, k', \tau) \vec{\theta}(k, k') \right\}, \quad (4.3)$$

wobei \vec{e}_j und $\vec{\theta}$ aus \mathcal{C}^Δ sind und \mathbf{M}_1 eine komplexe 4×4 -Matrix ist.

\vec{e}_j , $\vec{\theta}$ und \mathbf{M}_1 sehen wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \vec{e}_j(k, k') &= \begin{pmatrix} e^{i(k+k')aj} \\ e^{i(k-k')aj} \\ e^{-i(k-k')aj} \\ e^{-i(k+k')aj} \end{pmatrix} \\ \mathbf{M}_{1,s}(k, k', \tau) &= \begin{pmatrix} A_{s,T}(k, \tau) & D_s(k, k', \tau) & 0 & A_{s,T'}^*(k', \tau) \\ C_s(k, k', \tau) & B_{s,T}(k, \tau) & B_{s,T'}^*(k', \tau) & 1 \\ 1 & B_{s,T'}^*(k', \tau) & B_{s,T}(k, \tau) & C_s(k, k', \tau) \\ A_{s,T'}^*(k', \tau) & 0 & D_s(k, k', \tau) & A_{s,T}(k, \tau) \end{pmatrix} \\ \vec{\theta}(k, k') &= \begin{pmatrix} \theta(k) \theta(k') \\ \theta(k) \theta(-k') \\ \theta(-k) \theta(k') \\ \theta(-k) \theta(-k') \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} C_s(k, k', \tau) &= B_{s,T}(k, \tau) B_{s,T'}^*(k', \tau) + A_{s,T}(k, \tau) A_{s,T'}^*(k', \tau) \\ D_s(k, k', \tau) &= A_{s,T}(k, \tau) B_{s,T'}^*(k', \tau) + B_{s,T}(k, \tau) A_{s,T'}^*(k', \tau). \end{aligned}$$

4.1.1 $k k' < 0$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei $0 < k < \frac{\pi}{a}$ und $-\frac{\pi}{a} < k' < 0$. Damit vereinfacht sich $\vec{\theta}(k, k')$ zu:

$$\vec{\theta}(k, k') = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

und es gilt:

$$\begin{aligned} {}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s &= \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,R}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) \right. \\ &+ \left. \left[\sum_{j=1}^{\infty} D_s(k, k', \tau) e^{i(k+k')aj} + B_{s,L}(k, \tau) e^{i(k-k')aj} + B_{s,R}^*(k', \tau) e^{-i(k-k')aj} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Gemäß den Formeln des Anhangs A ergibt sich:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,R}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[D_s(k, k', \tau) S(k + k', \epsilon) + B_{s,L}(k, \tau) S(k - k', \epsilon) + B_{s,R}^*(k', \tau) S(k' - k, \epsilon) \right] \right\}. \quad (4.6)$$

Weil $-\frac{\pi}{a} < k + k' < \frac{\pi}{a}$, $0 < k - k' < \frac{2\pi}{a}$ und weil

$$D_s(k, k', \tau) = f_s(k, k', \tau) \sin \frac{(k + k')a}{2} \quad (4.7)$$

gilt, ergibt sich gemäß Abschnitt A.2.1:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,R}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) + f_s(k, k', \tau) U(k + k', 0) + \frac{1}{2} \left[B_{s,L}(k, \tau) \left(-1 + i \cot \frac{(k - k')a}{2} \right) + B_{s,R}^*(k', \tau) \left(-1 - i \cot \frac{(k - k')a}{2} \right) \right] \right\}, \quad (4.8)$$

$$\text{mit } f_1(k, k', \tau) = \frac{4i\tau(1 - \tau^2)}{N_1(k)N_1(k')} \cos \frac{(k + k')a}{2}, \quad N_1(k) = \tau^2 e^{ika} - e^{-ika}$$

$$\text{und } f_2(k, k', \tau) = \frac{2i\tau^2}{N_2(k)N_2(k')} \left[(1 - \tau^2) \cos \frac{(k + k')a}{2} - \lambda \cos \frac{(k - k')a}{2} \right], \quad (4.9)$$

$$N_2(k) = \lambda - (1 - \tau^2) \cos ka + i\tau^2 \sin ka$$

berechnet sich ${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s$ mit Hilfe der stetigen Fortsetzbarkeit von $U(k + k', 0)$ gemäß (A.13) und (A.14) für $k' = -k$ zu:

$${}_1\langle -k, \tau | k, \tau \rangle_1 = \frac{1}{N N_1(-k) N_1(k)} \times [4\tau \sin^2 ka - 2\tau(1 - \tau^2) - \tau N_1(-k) e^{ika} - \tau N_1(k) e^{-ika}] = 0$$

bzw. (4.10)

$${}_2\langle -k, \tau | k, \tau \rangle_2 = \frac{\tau^2}{N N_2(-k) N_2(k)} \times [\sin^2 ka - (1 - \tau^2) + \lambda \cos ka - \frac{1}{2} N_2(-k) e^{ika} - \frac{1}{2} N_2(k) e^{-ika}] = 0.$$

Damit sind die Zustände $|k, \tau\rangle_s$ und $|-k, \tau\rangle_s$ für $s = 1, 2$ zueinander orthogonal.

4.1.2 $k, k' > 0$

Jetzt soll gelten $0 < k, k' < \frac{\pi}{a}$. Damit nimmt $\vec{\theta}(k, k')$ die folgende Gestalt an:

$$\vec{\theta}(k, k') = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

und man erhält:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,L}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) + \left[\sum_{j=1}^{\infty} A_{s,L}(k, \tau) e^{i(k+k')aj} \right. \right. \\ \left. \left. + C_s(k, k', \tau) e^{i(k-k')aj} + e^{-i(k-k')aj} + A_{s,L}^*(k', \tau) e^{-i(k+k')aj} \right] \right\}. \quad (4.11)$$

Mit Hilfe des Anhangs A leitet man ab:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,L}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [A_{s,L}(k, \tau) S(k+k', \epsilon) \right. \\ \left. + C_s(k, k', \tau) S(k-k', \epsilon) + S(k'-k, \epsilon) + A_{s,L}^*(k', \tau) S(-k-k', \epsilon)] \right\}. \quad (4.12)$$

Wegen $0 < k+k' < \frac{2\pi}{a}$, $-\frac{\pi}{a} < k-k' < \frac{\pi}{a}$ und

$$C_s(k, k', \tau) = 1 + f_s(k, -k', \tau) [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{1s}] \sin \frac{(k-k')a}{2} \quad \text{folgt} \quad (4.13)$$

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left\{ [B_{s,L}^0(k', \tau)]^* B_{s,L}^0(k, \tau) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left[A_{s,L}(k, \tau) \left(-1 + i \cot \frac{(k+k')a}{2} \right) + A_{s,L}^*(k', \tau) \left(-1 - i \cot \frac{(k+k')a}{2} \right) \right] \right. \\ \left. \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[f_s(k, -k', \tau) [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{1s}] \sin \frac{(k-k')a}{2} S(k-k', \epsilon) + 2\Re[S(k-k', \epsilon)] \right] \right\}. \quad (4.14)$$

Der Grenzwert wird mit Hilfe von Formeln des Abschnitts A.2 berechnet:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[f_s(k, -k', \tau) [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{1s}] \sin \frac{(k-k')a}{2} S(k-k', \epsilon) + 2\Re[S(k-k', \epsilon)] \right] \\ = f_s(k, -k', \tau) [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{1s}] U(k-k', 0) - 1 + \frac{2\pi}{a} \delta(k-k'). \quad (4.15)$$

Spaltet man von ${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s$ die δ -Funktion ab:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \left[g_s(k, k', \tau) + \frac{2\pi}{a} \delta(k-k') \right], \quad (4.16)$$

und setzt $k' = k$, so erhält man:

$$g_1(k, k, \tau) = -1 + \frac{1}{|N_1(k)|^2 \sin ka} \\ \times \left\{ 4 \sin^3 ka - 2(1 - \tau^2) \sin ka + \frac{1}{2} i(1 - \tau^2) [N_1^*(k) e^{2ika} - N_1(k) e^{-2ika}] \right\} = 0 \\ \text{bzw.} \quad (4.17)$$

$$g_2(k, k, \tau) = \frac{\tau^2}{|N_2(k)|^2} \\ \times [\sin^2 ka - (1 - \tau^2) + \lambda \cos ka - \frac{1}{2} N_2^*(k) e^{ika} - \frac{1}{2} N_2(k) e^{-ika}] = 0.$$

Also gilt:

$${}_s\langle k', \tau | k, \tau \rangle_s = \frac{1}{N} \frac{2\pi}{a} \delta(k-k'), \quad (4.18)$$

womit die Normierungskonstante N durch

$$N = \frac{2\pi}{a} \quad (4.19)$$

festgelegt ist.

Für negative k, k' liefert eine analoge Rechnung das gleiche Ergebnis.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die ausgedehnten Zustände in beiden Modellen mit N gemäß (4.19) orthonormiert sind.

4.1.3 Gebundene Zustände

- Im Fall $s = 2, \tau = 0$ ist gemäß Konstruktion $|k = 0, \tau = 0\rangle = |0, 0\rangle$ automatisch orthonormiert, denn kein ausgedehnter Zustand beinhaltet den Basiszustand $|r_0\rangle$ und aufgrund (2.2) gilt:

$$\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle = \langle r_0 | r_0 \rangle = 1.$$

- Im Fall $\tau \neq 0$ liegen die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände über oder unter den Eigenwerten der ausgedehnten Zustände. Damit sind nur noch die Normierungskonstanten für die lokalisierten Zustände zu bestimmen.

Für die betreffenden k -Werte gilt:

$$\langle k, \tau | k, \tau \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=-\infty}^{\infty} |c_j(k, \tau)|^2 = 1$$

1. Fall: $s = 1$:

Mit (3.23) ergibt sich:

$$N = \sum_{j=-\infty}^0 |\beta e^{ika(1-j)}|^2 + \sum_{j=1}^{\infty} |e^{ikaj}|^2 = 2 \sum_{j=1}^{\infty} e^{2ikaj} = \frac{2}{e^{-2ika} - 1},$$

$$\text{also für } \tau > 1 \quad \text{mit} \quad k_\beta a = \frac{\pi}{2}(1 - \beta) + i \ln \tau$$

$$\text{und für } \tau < -1 \quad \text{mit} \quad k_\beta a = \frac{\pi}{2}(1 + \beta) + i \ln(-\tau) \quad \text{gilt:}$$

$$N_{g,1}(\tau) = N_{g,1,\beta}(\tau) = \frac{2}{\tau^2 - 1}. \quad (4.20)$$

2. Fall: $s = 2$:

Wegen (3.46) errechnet man:

$$N = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |e^{ika|j|}|^2 [1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{0j}]^2 = \frac{1}{\tau^2} + 2 \sum_{j=1}^{\infty} e^{2ikaj} = \frac{1}{\tau^2} + \frac{2}{e^{-2ika} - 1}. \quad (4.21)$$

Das bedeutet, daß man

$$\text{für } \tau^2 - 1 + \lambda \beta > 0$$

$$\text{mit } k_\beta a = \frac{\pi}{2}(1 - \beta) + i \ln \left[\lambda \beta + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] \quad (4.22)$$

$$N_{g,2,\beta}(\tau, \lambda) = \frac{1}{\tau^2} + \frac{1}{\lambda \left[\lambda + \beta \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)} \quad \text{erhält.}$$

Somit sind alle Normierungskonstanten bestimmt, und man kann mit der Betrachtung der Vollständigkeit beginnen.

4.2 Vollständigkeit

Weist das System sowohl ausgedehnte als auch gebundene Zustände auf, so ist zu zeigen, daß die folgende Beziehung gültig ist:

$$\hat{I}_{\mathcal{E}} = \hat{V}_{a,s}(\tau) + \hat{V}_{g,s}(\tau) = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_a |k_a, \tau\rangle_s \langle k_a, \tau| + \sum_j |k_{g,j}, \tau\rangle_s \langle k_{g,j}, \tau|, \quad (4.23)$$

wobei durch $|k_a, \tau\rangle_s$ ausgedehnte und durch $|k_{g,j}, \tau\rangle_s$ gebundene Zustände bezeichnet werden.

Zunächst sollen die ausgedehnten Zustände mit $\tau \neq 0$ betrachtet werden.

4.2.1 Ausgedehnte Zustände

Aufgrund von (4.1) gilt:

$$\hat{V}_{a,s}(\tau) = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \left(\sum_{j,l=-\infty}^{\infty} c_{j,s}(k, \tau) c_{l,s}^*(k, \tau) |r_j\rangle \langle r_l| \right). \quad (4.24)$$

Nach Vertauschen von Summation und Integration erhält man:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{a,s}(\tau) &= \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk c_{j,s}(k, \tau) c_{l,s}^*(k, \tau) \right) |r_j\rangle \langle r_l| \\ &=: \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} v_{j,l,s}(\tau) |r_j\rangle \langle r_l|, \quad \text{also} \\ v_{j,l,s}(\tau) &= \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk c_{j,s}(k, \tau) c_{l,s}^*(k, \tau). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Das Aufspalten des Integrals in den von rechts und links einlaufenden Anteil ergibt:

$$\begin{aligned} v_{j,l,s}(\tau) &= \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \left[c_{j,s}(-k, \tau) c_{l,s}^*(-k, \tau) + c_{j,s}(k, \tau) c_{l,s}^*(k, \tau) \right], \\ \text{und man erkennt:} \quad v_{j,l,s}(\tau) &= v_{l,j,s}^*(\tau). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Wegen (4.1) nimmt man eine Aufspaltung in drei Fälle vor:

1. Fall: $j = l = 0$

Das Einsetzen von (4.1) in (4.26) liefert:

$$\begin{aligned} v_{0,0,s}(\tau) &= \frac{a}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \left[|B_{s,R}^0(-k, \tau)|^2 + |B_{s,L}(k, \tau)|^2 \right] \\ &= \frac{a}{2\pi} f_{1,s}(\tau) \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk T_s(k, \tau), \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\text{mit} \quad f_{1,s}(\tau) = \left(1 + \frac{1}{\tau^2}\right) \delta_{s1} + \frac{2}{\tau^2} \delta_{s2}.$$

2. Fall: $j = 0, \quad l \neq 0$

Hier ergibt sich:

$$\begin{aligned}
v_{0,l,s}(\tau) &= \frac{a}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk B_{s,R}^0(-k, \tau) \\
&\quad \times \left[\theta(l) \left(e^{ikal} + A_{s,R}^*(-k, \tau) e^{-ikal} \right) + \theta(-l) B_{s,R}^*(-k, \tau) e^{ikal} \right] \\
&\quad + B_{s,L}^0(k, \tau) \left[\theta(-l) \left(e^{-ikal} + A_{s,L}^*(k, \tau) e^{ikal} \right) + \theta(l) B_{s,L}^*(k, \tau) e^{-ikal} \right] \\
&= \frac{a}{2\pi} f_{2,s}(\tau) \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk 2\Re \left[B_s(k, \tau) e^{ika|l|} \right], \quad \text{wobei} \quad (4.28) \\
f_{2,s}(\tau) &= \delta_{s1} \left[\theta(l) + \frac{1}{\tau} \theta(-l) \right] + \frac{1}{\tau} \delta_{s2}.
\end{aligned}$$

3. Fall: $j, l \neq 0$

Dieser Fall wird etwas ausführlicher dargestellt. Es gilt:

$$\begin{aligned}
v_{j,l,s}(\tau) &= \frac{a}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \left[\theta(j) \left(e^{-ikaj} + A_{s,R}(-k, \tau) e^{ikaj} \right) + \theta(-j) B_{s,R}(-k, \tau) e^{-ikaj} \right] \\
&\quad \times \left[\theta(l) \left(e^{ikal} + A_{s,R}^*(-k, \tau) e^{-ikal} \right) + \theta(-l) B_{s,R}^*(-k, \tau) e^{ikal} \right] \\
&\quad + \left[\theta(-j) \left(e^{ikaj} + A_{s,L}(k, \tau) e^{-ikaj} \right) + \theta(j) B_{s,L}(k, \tau) e^{ikaj} \right] \quad (4.29) \\
&\quad \times \left[\theta(-l) \left(e^{-ikal} + A_{s,L}^*(k, \tau) e^{ikal} \right) + \theta(l) B_{s,L}^*(k, \tau) e^{-ikal} \right].
\end{aligned}$$

Äquivalente Umformungen führen zu:

$$\begin{aligned}
v_{j,l,s}(\tau) &= \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \quad \vec{e}_{j,l}^T(k) M_{2,s}(k, \tau) \vec{\theta}(j, l), \quad \text{mit} \\
\vec{e}_{j,l}(k) &= \begin{pmatrix} e^{ika(j+l)} \\ e^{ika(j-l)} \\ e^{-ika(j-l)} \\ e^{-ika(j+l)} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (4.30)
\end{aligned}$$

$$M_{2,s}(k, \tau) = \begin{pmatrix} A_{s,R}(-k, \tau) & D_s(k, \tau) & 0 & A_{s,L}^*(k, \tau) \\ C_s(k, \tau) & B_{s,L}(k, \tau) & B_{s,L}^*(k, \tau) & 1 \\ 1 & B_{s,R}^*(-k, \tau) & B_{s,R}(-k, \tau) & \tilde{C}_s(k, \tau) \\ A_{s,R}^*(-k, \tau) & 0 & D_s^*(k, \tau) & A_{s,L}(k, \tau) \end{pmatrix}, \quad \text{wobei}$$

$$\begin{aligned}
C_s(k, \tau) &= |A_{s,R}(-k, \tau)|^2 + |B_{s,L}(k, \tau)|^2 \\
\tilde{C}_s(k, \tau) &= |A_{s,L}(k, \tau)|^2 + |B_{s,R}(-k, \tau)|^2 \\
D_s(k, \tau) &= A_{s,R}(-k, \tau) B_{s,R}^*(-k, \tau) + A_{s,L}^*(k, \tau) B_{s,L}(k, \tau) \quad \text{gilt.}
\end{aligned}$$

Mit den Vereinfachungen:

$$D_s(k, \tau) \equiv 0, \quad C_s(k, \tau) = \tilde{C}_s(k, \tau) \equiv 1$$

und mit Hilfe von (3.14) und (3.32) kann $M_{2,s}(k, \tau)$ in zwei Matrizen zerlegt werden:

$$M_{2,s}(k, \tau) = M_2^{(0)} + M_{2,s}^{(B)}(k, \tau).$$

Dabei nehmen $\mathbf{M}_2^{(0)}$ und $\mathbf{M}_{2,s}^{(B)}(k, \tau)$ die folgende Gestalt an:

$$\mathbf{M}_2^{(0)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

$$\mathbf{M}_{2,s}^{(B)}(k, \tau) = \begin{pmatrix} (\tau \delta_{s1} + \delta_{s2}) B_s(k, \tau) & 0 & 0 & (\frac{1}{\tau} \delta_{s1} + \delta_{s2}) B_s^*(k, \tau) \\ 0 & B_s(k, \tau) & B_s^*(k, \tau) & 0 \\ 0 & B_s^*(k, \tau) & B_s(k, \tau) & 0 \\ (\tau \delta_{s1} + \delta_{s2}) B_s^*(k, \tau) & 0 & 0 & (\frac{1}{\tau} \delta_{s1} + \delta_{s2}) B_s(k, \tau) \end{pmatrix}.$$

Mittels der Zerlegung von $\mathbf{M}_{2,s}$ kann man $v_{j,l,s}$ in analoger Weise aufspalten:

$$v_{j,l,s}(\tau) = v_{j,l}^{(0)} + v_{j,l,s}^{(B)}(\tau). \quad (4.32)$$

- Man erkennt, daß für $j \cdot l < 0$ $\mathbf{M}_2^{(0)}$ keinen Beitrag zu $v_{j,l}^{(0)}$ liefert. Andernfalls gilt [9]:

$$\vec{e}_{j,l}^T(k) \mathbf{M}_2^{(0)} \vec{\theta}(j, l) = -e^{ika(j+l)} + e^{ika(j-l)} + e^{-ika(j-l)} - e^{-ika(j+l)} = 4 \sin kaj \sin kal. \quad (4.33)$$

Also ergibt sich für $v_{j,l}^{(0)}$:

$$v_{j,l}^{(0)} = \theta(jl) \frac{a}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \, 2 \sin kaj \sin kal = \theta(jl) \frac{a}{\pi} \delta_{jl} \frac{\pi}{a} = \theta(jl) \delta_{jl}, \quad (4.34)$$

was man durch zweifache partielle Integration unter Beachtung des Spezialfalls $j = l$ zeigen kann.

- Den anderen Teil kann man zu

$$\begin{aligned} \vec{e}_{j,l}^T(k) \mathbf{M}_{2,s}^{(B)}(k, \tau) \vec{\theta}(j, l) &= \left[(\tau \delta_{s1} + \delta_{s2}) \theta(j) \theta(l) + \theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{\tau} \delta_{s1} + \delta_{s2} \right) \theta(-j) \theta(-l) \right] \cdot 2 \Re \left[B_s(k, \tau) e^{ika(|j|+|l|)} \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

zusammenfassen.

Damit wird $v_{j,l,s}(\tau)$ zu:

$$v_{j,l,s}(\tau) = \theta(jl) \delta_{jl} + \frac{a}{\pi} f_{3,j,l,s}(\tau) \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \, \Re \left[B_s(k, \tau) e^{ika(|j|+|l|)} \right], \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } f_{3,j,l,s}(\tau) &= (\tau \delta_{s1} + \delta_{s2}) \theta(j) \theta(l) + \frac{1}{\tau} (\delta_{s1} + \tau \delta_{s2}) \theta(-j) \theta(-l) \\ &\quad + \theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l). \end{aligned}$$

Zusammenfassung der drei Fälle

Im Fall 2 und 3 weisen die Integranden die gleiche Struktur auf. Im Fall 1 gilt es nun, von $T_s(k, \tau)$ zu $\Re [B_s(k, \tau)]$ zu gelangen. Betrachtet man (3.14) und (3.35), so erhält man:

$$f_{1,s}(\tau) T_s(k, \tau) = \frac{2}{\tau^2} (\tau \delta_{s1} + \delta_{s2}) \Re [B_s(k, \tau)]. \quad (4.37)$$

Setzt man

$$B_s(k, \tau) = \tau^s \bar{B}_s(k, \tau)$$

und zieht jetzt alle drei Fälle in Betracht, so ergibt sich $v_{j,l,s}(\tau)$ zu:

$$v_{j,l,s}(\tau) = \theta(jl) \delta_{jl} + \frac{a}{\pi} f_{j,l,s}(\tau) \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \Re \left[\bar{B}_s(k, \tau) e^{ika(|j|+|l|)} \right], \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } f_{j,l,s}(\tau) = & (1 - 2\tau) \delta_{j0} \delta_{l0} + \tau(\delta_{j0} + \delta_{l0}) \\ & + \delta_{s1} (1 - \tau) [\theta(-j) \delta_{l0} + \theta(-l) \delta_{j0}] \\ & + \tau^2 \theta(j) \theta(l) + (\delta_{s1} + \tau^2 \delta_{s2}) \theta(-j) \theta(-l) \\ & + \tau^s [\theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l)]. \end{aligned}$$

Bestimmung von $I_{j,s}(\tau)$

Als einzige unbekannte Größe in (4.38) bleibt

$$I_{j,s}(\tau) = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \Re \left[\bar{B}_s(k, \tau) e^{ikaj} \right] = \Re \left[\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \bar{B}_s^*(k, \tau) e^{-ikaj} \right], \quad j \in \mathcal{N}, \quad (4.39)$$

zu berechnen.

Dieses Integral einer komplexwertigen Funktion über ein reelles Intervall führt man in ein Kurvenintegral längs des Weges γ in der komplexen Ebene über.

Dabei sei der Weg γ wie folgt parametrisiert:

$$\gamma: \begin{cases} [0, \frac{\pi}{a}] & \rightarrow \mathcal{C} \\ k & \mapsto z = \gamma(k) = e^{ika} \end{cases}, \quad \gamma'(k) = ia e^{ika} = ia \gamma(k), \quad (4.40)$$

und das Wegintegral berechnet sich nach:

$$\int_{\gamma} dz f(z) = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk f(\gamma(k)) \gamma'(k). \quad (4.41)$$

Zuvor wird die unecht gebrochenrationale Funktion

$$\tilde{B}_s(z, \tau) := \bar{B}_s^*(k, \tau)$$

in eine ganzrationale und eine echt gebrochenrationale Funktion zerlegt:

$$\tilde{B}_s(z, \tau) = \tilde{B}_{s,a}(\tau) + \tilde{B}_{s,b}(z, \tau) = \tilde{B}_{s,a}(\tau) + \bar{B}_{s,b}^*(k, \tau), \quad (4.42)$$

und der ganzrationale Anteil integriert.

Dabei erhält man:

$$\begin{aligned} \bar{B}_1^*(k, \tau) &= \frac{e^{-ika} - e^{ika}}{\tau^2 e^{-ika} - e^{ika}} = 1 + \frac{1 - \tau^2}{\tau^2 - e^{2ika}} \\ \bar{B}_2^*(k, \tau) &= \frac{e^{-ika} - e^{ika}}{2\lambda - (1 - 2\tau^2) e^{-ika} - e^{ika}} = 1 + 2 \frac{\lambda e^{ika} - (1 - \tau^2)}{e^{2ika} - 2\lambda e^{ika} + (1 - 2\tau^2)}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{1,a}(\tau) = \tilde{B}_{2,a}(\tau) &= 1, & \tilde{B}_{1,b}(z, \tau) &= \frac{1 - \tau^2}{\tau^2 - z^2}, \\ \tilde{B}_{2,b}(z, \tau) &= 2 \frac{\lambda z - (1 - \tau^2)}{z^2 - 2\lambda z + (1 - 2\tau^2)}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Die Integration über $\tilde{B}_{s,a}(\tau) e^{-ika}$ liefert:

$$\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \tilde{B}_{s,a}(\tau) e^{-ika} = \begin{cases} \pi/a & j = 0 \\ 0 & j = 2l \quad l \in \mathcal{N} \\ -2i/(aj) & j = 2l - 1 \quad l \in \mathcal{N} \end{cases}. \quad (4.45)$$

Deshalb gilt:

$$\begin{aligned} I_{j,s}(\tau) &= \frac{\pi}{a} \delta_{j0} + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \bar{B}_{s,b}^*(k, \tau) e^{-ika} \frac{ia e^{ika}}{ia e^{ika}} \\ &= \frac{\pi}{a} \delta_{j0} + \Re \left[\int_{\gamma} dz \frac{\tilde{B}_{s,b}(z, \tau)}{ia z^{j+1}} \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Als nächstes ist eine Partialbruchzerlegung auszuführen:

$$\frac{\tilde{B}_{s,b}(z, \tau)}{z^{j+1}} = \frac{\tilde{b}_{s,b}(z, \tau)}{[z - d_{s,1}(\tau)][z - d_{s,2}(\tau)] z^{j+1}} = \frac{a_{j,s,1}(\tau)}{z - d_{s,1}(\tau)} + \frac{a_{j,s,2}(\tau)}{z - d_{s,2}(\tau)} + \sum_{n=1}^{j+1} \frac{b_{j,s,n}(\tau)}{z^n}, \quad (4.47)$$

wobei die Koeffizienten explizit in Anhang B.1 berechnet werden.

Für $n \geq 2$ besitzt $f(z) = z^{-n}$ die Stammfunktion $F(z) = -(n-1)^{-1} z^{-n+1}$ (siehe dazu auch [10]).

Damit gilt:

$$\int_{\gamma} dz \left[\sum_{n=2}^{j+1} \frac{b_{j,s,n}(\tau)}{ia z^n} \right] = \frac{1}{ia} \sum_{n=2}^{j+1} \left[\frac{-b_{j,s,n}(\tau)}{(n-1) z^{n-1}} \Big|_{\gamma(0)}^{\gamma(\frac{\pi}{a})} \right] = \frac{1}{ia} \sum_{n=2}^{j+1} \left[\frac{b_{j,s,n}(\tau)}{(n-1)} (1 + (-1)^n) \right], \quad (4.48)$$

was eine rein imaginäre Größe ist.

Analoges gilt für $f(z) = (z - \lambda)^{-2}$, was beispielsweise für $\lambda^2 = 1 - 2\tau^2$ in der Partialbruchzerlegung auftritt.

Mit

$$\int_{\gamma} dz \left[\frac{b_{j,s,1}(\tau)}{iaz} \right] = \frac{b_{j,s,1}(\tau)}{ia} \int_{\gamma} dz \frac{1}{z} = \frac{b_{j,s,1}(\tau)}{ia} \pi i = \frac{\pi}{a} b_{j,s,1}(\tau) \quad (4.49)$$

ergibt sich

$$I_{j,s}(\tau) = \frac{\pi}{a} [\delta_{j0} + b_{j,s,1}(\tau)] + \Re \left[\frac{1}{ia} \int_{\gamma} dz \left(\frac{a_{j,s,1}(\tau)}{z - d_{s,1}(\tau)} + \frac{a_{j,s,2}(\tau)}{z - d_{s,2}(\tau)} \right) \right]. \quad (4.50)$$

In (4.50) tritt nun das Integral

$$\int_{\gamma} dz \frac{1}{z - d_{s,m}(\tau)} \quad \text{auf.}$$

Mit (4.41) und dem Weg:

$$\gamma_{s,m} : \begin{cases} [0, \frac{\pi}{a}] & \rightarrow \mathcal{C} \\ k & \mapsto \gamma_{s,m}(k) = \gamma(k) - d_{s,m}(\tau) \end{cases}, \quad \gamma'_{s,m}(k) = ia \gamma(k), \quad (4.51)$$

$$\text{gilt:} \quad \int_{\gamma} dz \frac{1}{z - d_{s,m}(\tau)} = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{ia \gamma(k)}{\gamma(k) - d_{s,m}(\tau)} = \int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z}. \quad (4.52)$$

Deshalb errechnet man:

$$I_{j,s}(\tau) = \frac{\pi}{a} \left\{ \delta_{j0} + b_{j,2,1}(\tau) + \Re \left[\frac{1}{\pi i} \sum_m a_{j,s,m}(\tau) \int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} \right] \right\}. \quad (4.53)$$

Die Berechnung der in (4.53) auftretenden Wegintegrale wird in Anhang B.2 vollzogen. Als Zwischenergebnis erhält man:

$$\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} = \left[\ln \left| \gamma_{s,m} \left(\frac{\pi}{a} \right) \right| - \ln |\gamma_{s,m}(0)| \right] + i \left[\arg \left\{ \gamma_{s,m} \left(\frac{\pi}{a} \right) \right\} - \arg \{ \gamma_{s,m}(0) \} \right],$$

was nach Einsetzen der Funktionen in den unterschiedlichen Fällen zum folgenden Ergebnis führt (ausführlicher in Anhang B.2):

$$I_{j,1}(\tau) = \frac{\pi}{a} \left\{ \delta_{j0} - \theta(\tau^2 - 1) [a_{j,1,1}(\tau) + a_{j,1,2}(\tau)] \right\} \quad (4.54)$$

$$I_{j,2}(\tau) = \frac{\pi}{a} \left\{ \delta_{j0} - [\theta(\tau^2 - 1 + \lambda) a_{j,2,1}(\tau) + \theta(\tau^2 - 1 - \lambda) a_{j,2,2}(\tau)] \right\}. \quad (4.55)$$

Bestimmung von $\hat{V}_{a,s}(\tau)$:

Aus (4.25), (4.38), (4.39), (4.54) und (4.55) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{a,1}(\tau) &= \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \left[\theta(jl) \delta_{jl} + \frac{a}{\pi} \left\{ (1 - 2\tau) \delta_{j0} \delta_{l0} + \tau(\delta_{j0} + \delta_{l0}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - \tau) [\theta(-j) \delta_{l0} + \theta(-l) \delta_{j0}] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \theta(-j) \theta(-l) + \tau[\theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l)] + \tau^2 \theta(j) \theta(l) \right\} \right] |r_j\rangle \langle r_l| \\ &= \hat{I}_{\mathcal{E}} - \theta(\tau^2 - 1) \left\{ \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} f_{j,l,1}(\tau) [a_{|j|+|l|,1,1}(\tau) + a_{|j|+|l|,1,2}(\tau)] |r_j\rangle \langle r_l| \right\}. \quad (4.56) \end{aligned}$$

Mit Anhang B.3 ist für $0 \leq \tau^2 \leq 1$ die Vollständigkeit gezeigt.

$$\begin{aligned} \hat{V}_{a,2}(\tau) &= \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \left[\theta(jl) \delta_{jl} + \frac{a}{\pi} \left\{ (1 - 2\tau) \delta_{j0} \delta_{l0} + \tau(\delta_{j0} + \delta_{l0}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \tau^2 [\theta(-j) \theta(-l) + \theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l) + \theta(j) \theta(l)] \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\pi}{a} \left\{ \delta_{|j|+|l|,0} - \theta(\tau^2 - 1 + \lambda) a_{|j|+|l|,2,1}(\tau) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \theta(\tau^2 - 1 - \lambda) a_{|j|+|l|,2,2}(\tau) \right\} \right] |r_j\rangle \langle r_l| \quad (4.57) \\ &= \hat{I}_{\mathcal{E}} - \left\{ \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \left[\theta(\tau^2 - 1 + \lambda) a_{|j|+|l|,2,1}(\tau) + \theta(\tau^2 - 1 - \lambda) a_{|j|+|l|,2,2}(\tau) \right] \right. \\ &\quad \left. \times f_{j,l,2}(\tau) |r_j\rangle \langle r_l| \right\}, \end{aligned}$$

womit für $|\lambda| \leq 1 - \tau^2$ die Vollständigkeit nachgewiesen, und die Behandlung der ausgedehnten Zustände abgeschlossen ist.

4.2.2 Gebundene Zustände

Zur Behandlung der Zustände zieht man die Gleichungen (4.1) und (4.23) in Betracht.

Deshalb gilt:

$$\hat{V}_{g,s}(\tau) = \sum_{\beta} \frac{\theta(g_{s,\beta}(\tau))}{\tau^2 N_{g,s,\beta}(\tau)} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ik_{\beta}a|j|} e^{-ik_{\beta}^*a|l|} h_{j,l,s,\beta}(\tau) |r_j\rangle \langle r_l|. \quad (4.58)$$

Nun sind in den unterschiedlichen Fällen die Funktionen $g_{s,\beta}$ und $h_{j,l,s,\beta}$ zu bestimmen und in die Gleichung für $\hat{V}_{g,s}(\tau)$ einzusetzen, um danach mit Hilfe von (4.23) die Vollständigkeit überprüfen zu können.

1.Fall: $s = 1$:

Aus (3.26), (3.23) und (4.20) folgt:

$$\begin{aligned} g_{1,\beta}(\tau) &= \tau^2 - 1 + \lambda \beta \\ N_{g,1,\beta}(\tau) &= N_{g,1}(\tau) = \frac{2}{\tau^2 - 1} \\ k_{\beta}a &= \frac{\pi}{2} [1 - \beta \operatorname{sgn} \tau] + i \ln |\tau| \quad \Rightarrow \quad e^{ik_{\beta}a} = e^{-ik_{\beta}^*a} = \frac{\beta}{\tau} \\ h_{j,l,1,\beta}(\tau) &= \tau^2 [\theta(j) + \beta e^{ik_{\beta}a} \theta(1-j)] [\theta(l) + \beta e^{-ik_{\beta}^*a} \theta(1-l)] \\ &= \tau^2 \left\{ \theta(j) + \frac{1}{\tau} [\delta_{j0} + \theta(-j)] \right\} \left\{ \theta(l) + \frac{1}{\tau} [\delta_{l0} + \theta(-l)] \right\} \\ &= \left\{ \tau^2 \theta(j) \theta(l) + \tau [\theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l)] + \theta(-j) \theta(-l) \right. \\ &\quad \left. + \delta_{j0} [\tau \theta(l) + \theta(-l)] + \delta_{l0} [\tau \theta(j) + \theta(-j)] + \delta_{j0} \delta_{l0} \right\} \\ &= h_{j,l,1}(\tau), \quad \text{unabhängig von } \beta, \quad \lambda = 0. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Desweiteren gilt:

$$\sum_{\beta} \frac{e^{ik_{\beta}a|j|} e^{-ik_{\beta}^*a|l|}}{\tau^2 N_{g,1}(\tau)} = \sum_{\beta} \frac{\tau^2 - 1}{2\tau^2 (\beta \tau)^{|j|+|l|}} = \frac{\tau^2 - 1}{2} \left(\frac{1}{\tau^{|j|+|l|+2}} + \frac{1}{(-\tau)^{|j|+|l|+2}} \right). \quad (4.60)$$

Vergleicht man (4.60) mit (B.7) und setzt beides in (4.58) ein, so erhält man:

$$\hat{V}_{g,1}(\tau) = \theta(\tau^2 - 1) \left\{ \sum_{j=-\infty}^{\infty} [a_{|j|+|l|,1,1}(\tau) + a_{|j|+|l|,1,2}(\tau)] h_{j,l,1}(\tau) |r_j\rangle \langle r_l| \right\},$$

was mit der Identität

$$h_{j,l,1}(\tau) = f_{j,l,1}(\tau)$$

und den Gleichungen (4.56) und (4.23) zu der angestrebten Vollständigkeit

$$\hat{V}_{a,1}(\tau) + \hat{V}_{g,1}(\tau) = \hat{I}_{\mathcal{E}}, \quad \forall \tau \quad \text{führt.} \quad (4.61)$$

2.Fall: $s = 2$:

Im vorliegenden Fall ergibt sich wegen (3.46) und (4.22):

$$\begin{aligned}
g_{2,\beta}(\lambda, \tau) &= \tau^2 - 1 + \lambda \beta \\
k_{\beta} a &= \frac{\pi}{2} (1 - \beta) + i \ln \left[\lambda \beta + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] \\
\Rightarrow e^{i k_{\beta} a} &= e^{-i k_{\beta}^* a} = \frac{\beta}{\lambda \beta + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}} \\
h_{j,l,2,\beta}(\lambda, \tau) &= \tau^2 \left[1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{j0} \right] \left[1 - (1 - \tau^{-1}) \delta_{l0} \right] \\
&= (1 - 2\tau) \delta_{j0} \delta_{l0} + \tau (\delta_{j0} + \delta_{l0}) + \tau^2 (1 - \delta_{j0}) (1 - \delta_{l0}) \\
&= h_{j,l,2}(\tau), \quad \text{unabhängig von } \lambda \text{ und } \beta.
\end{aligned} \tag{4.62}$$

Weiterhin ergeben:

$$\begin{aligned}
\frac{e^{i k_1 a (|j|+|l|)}}{\tau^2 N_{g,2,1}(\tau, \lambda)} &= \frac{\lambda \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)}{\left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{|j|+|l|} \left\{ \lambda \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - 2\tau^2) \right\}} \\
&= \frac{\lambda \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)}{\sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{|j|+|l|+1}} \tag{4.63}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{e^{i k_2 a (|j|+|l|)}}{\tau^2 N_{g,2,-1}(\tau, \lambda)} &= \frac{(-1)^{|j|+|l|} \left\{ \lambda \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2) \right\}}{\left[-\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{|j|+|l|} \left\{ \lambda \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - 2\tau^2) \right\}} \\
&= - \frac{\lambda \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)}{\sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{|j|+|l|+1}}, \tag{4.64}
\end{aligned}$$

für $\lambda = 1 - \tau^2$, $\tau^2 > 1$ ist:

$$\frac{e^{i k_2 a (|j|+|l|)}}{\tau^2 N_{g,2,-1}(\tau, \lambda)} = - \frac{(1 - \tau^2) (1 - \tau^2 - \tau^2) - (1 - \tau^2)}{\tau^2 (1 - 2\tau^2)^{|j|+|l|+1}} = \frac{2(1 - \tau^2)}{(1 - 2\tau^2)^{|j|+|l|+1}}, \tag{4.65}$$

und für $\lambda = \tau^2 - 1$, $\tau^2 > 1$ gilt:

$$\frac{e^{i k_1 a (|j|+|l|)}}{\tau^2 N_{g,2,1}(\tau, \lambda)} = \frac{(\tau^2 - 1) (\tau^2 - 1 + \tau^2) - (1 - \tau^2)}{\tau^2 (2\tau^2 - 1)^{|j|+|l|+1}} = - \frac{2(1 - \tau^2)}{[-(1 - 2\tau^2)]^{|j|+|l|+1}}. \tag{4.66}$$

Der Vergleich von (4.63) und (4.64) mit (B.15), von (4.65) mit (B.8) und von (4.66) mit (B.9) liefert mit (4.58) und (4.62):

$$\hat{V}_{g,2}(\tau) = \sum_{\beta} \theta \left(\tau^2 - 1 + \lambda \beta \right) \sum_{j=-\infty}^{\infty} a_{|j|+|l|,2,m}(\tau) h_{j,l,2}(\tau) |r_j\rangle \langle r_l|. \tag{4.67}$$

Mit der Identität

$$(1 - \delta_{j0}) (1 - \delta_{l0}) = \theta(j) \theta(l) + \theta(j) \theta(-l) + \theta(-j) \theta(l) + \theta(-j) \theta(-l) \Leftrightarrow h_{j,l,2}(\tau) = f_{j,l,2}(\tau)$$

erhält man aus (4.67), (4.57) und Anhang B.3:

$$\hat{V}_{a,2}(\tau) + \hat{V}_{g,2}(\tau) = \hat{I}_{\mathcal{E}} \quad \forall \lambda, \tau, \tag{4.68}$$

was die geforderte Vollständigkeit ist.

4.3 Zusammenfassung

In dieser Zusammenfassung sollen noch einmal die Eigenzustände in Abhängigkeit von λ und τ angegeben werden.

Zusätzlich zu den ausgedehnten Zuständen $|k, \tau\rangle_s$ für $0 < |k| < \frac{\pi}{a}$ treten die folgenden auf:

4.3.1 Modell 1 = Modell ohne ausgezeichnete Stelle

$$\begin{aligned} \tau^2 = 1 & \quad \text{zwei ausgedehnte Zustände} \quad |k, \tau\rangle_1 \quad \text{mit} \quad k = 0 \quad \text{und} \quad k = \frac{\pi}{a} \\ \tau^2 > 1 & \quad \text{zwei gebundene Zustände} \quad |k_\beta, \tau\rangle_1 \quad \text{mit} \quad k_\beta a = \frac{\pi}{2} (1 - \beta \operatorname{sgn} \tau) + i \ln |\tau|, \\ & \quad \beta = \pm 1. \end{aligned}$$

So ergibt sich der Hamiltonoperator des Systems zu:

$$\hat{H}_1(\tau) = \left\{ \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk E(k) |k, \tau\rangle_1 \langle k, \tau| \right\} + \theta(\tau^2 - 1) \left\{ \sum_{\beta} E(k_\beta) |k_\beta, \tau\rangle_1 \langle k_\beta, \tau| \right\}. \quad (4.69)$$

4.3.2 Modell 2 = Modell mit ausgezeichneter Stelle

$$\left. \begin{aligned} 1 > \lambda = 1 - \tau^2 \\ -1 < \lambda = \tau^2 - 1 \end{aligned} \right\} \text{ein ausgedehnter Zustand} \quad |k, \tau\rangle_2 \quad \text{mit} \quad \begin{cases} k = 0 \\ k = \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda > 1 - \tau^2, \tau \neq 0 \\ \lambda < \tau^2 - 1, \tau \neq 0 \\ \tau = 0 \end{aligned} \right\} \text{ein gebundener Zustand} \quad |k_\beta, \tau\rangle_2 \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \beta = 1 \\ \beta = -1 \end{cases},$$

$$\text{wobei} \quad k_\beta a = \theta(\tau^2) \cdot \left\{ \frac{\pi}{2} (1 - \beta) + i \left[\lambda \beta + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] \right\}.$$

Der Hamiltonoperator sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned} \hat{H}_2(\tau, \epsilon_0) &= \left\{ \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk E(k) |k, \tau\rangle_2 \langle k, \tau| \right\} + [1 - \theta(\tau) - \theta(-\tau)] \cdot \epsilon_0 \cdot |r_0\rangle \langle r_0| \quad (4.70) \\ &+ [\theta(\tau) + \theta(-\tau)] \left\{ \sum_{\beta} \theta(\tau^2 - 1 + \lambda \beta) E(k_\beta) |k_\beta, \tau\rangle_2 \langle k_\beta, \tau| \right\}. \end{aligned}$$

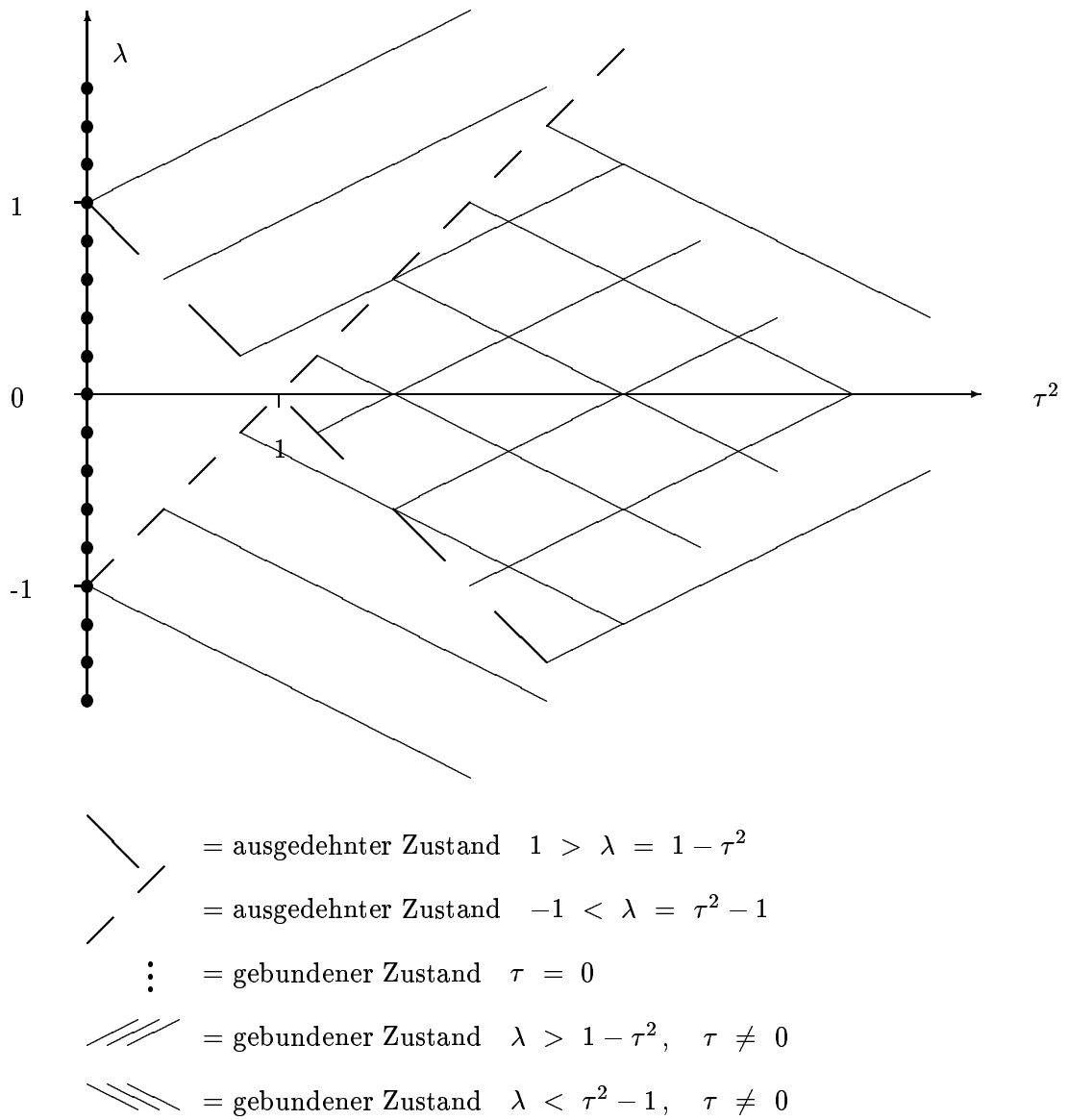
In Abbildung 4.1 sind die zusätzlichen Eigenzustände in Abhängigkeit von λ und τ^2 aufgetragen.

In den weiteren Rechnungen wird der Hamiltonoperator

$$\hat{H}_s(\tau) = \int dk E(k) |k, \tau\rangle_s \langle k, \tau| \quad (4.71)$$

verwendet, wobei die Integration die Summation über die gebundenen Zustände beinhalten soll:

$$\int dk \dots = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \dots + \sum_{\beta} \dots \quad (4.72)$$

Abbildung 4.1: Zusätzliche Eigenzustände in Modell 2 in Abhängigkeit von λ und τ^2 .

Kapitel 5

Zeitliche Entwicklung

5.1 Der Zeitentwicklungsoperator

In den vorhergehenden Kapiteln ist der Parameter t , der für die Zeit steht, nicht in Erscheinung getreten.

Da es sich bei dem zu behandelnden Problem um ein Nichtgleichgewichtsproblem handelt, gilt es nun die Abweichung vom Gleichgewicht zu beschreiben: Das Nichtgleichgewicht kommt dadurch zum Ausdruck, daß das elektrochemische Potential auf der linken Seite sich von dem der rechten Seite unterscheidet.

Das System werde wie folgt präpariert:

- Vor einem Zeitpunkt $t_e = 0$ sei $\tau = 0$, und zwar für beide Modelle. Das heißt, für $t < t_e$ liegen zwei getrennte Reservoirs vor.
- Zum Zeitpunkt $t_e = 0$ steigt τ sprunghaft auf den Wert τ_0 an, um diesen Wert dann beizubehalten.

So ergibt sich also τ als eine zeitabhängige Funktion zu:

$$\tau(t) = \theta(t - t_e) = \theta(t) \tau_0, \quad (5.1)$$

was einen zeitabhängigen Hamiltonoperator $\hat{H}_s(t)$ nach sich zieht:

$$\hat{H}_s(t) = \hat{H}_s(\tau(t)) = \begin{cases} \hat{H}_s(0) & t \leq 0 \\ \hat{H}_s(\tau_0) & t > 0 \end{cases}. \quad (5.2)$$

Nach der Theorie des Zeitentwicklungsoperators gelten die folgenden Beziehungen [7]:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle_s &= \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle_s \\ \hat{U}(t, t_0) &= \hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0), \end{aligned} \quad (5.3)$$

wobei $|\Psi(t)\rangle_s$ der Zustand eines Systems zum Zeitpunkt t und $\hat{U}(t, t')$ ein unitärer Operator ist.

Ist der Hamiltonoperator \hat{H} zeitunabhängig, so ist

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0) \right\} \quad \text{gültig.} \quad (5.4)$$

Zum Zeitpunkt $t = t_0 < 0$ befindet sich das System, das durch den Hamiltonoperator gemäß (5.2) beschrieben wird, im Zustand $|\Psi(t_0)\rangle_s$.

Aus (5.3) und (5.4) folgt, daß:

$$|\Psi(t)\rangle_s = \begin{cases} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(0)(t-t_0)\right\}|\Psi(t_0)\rangle_s & t \leq 0 \\ \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(\tau_0)t\right\}|\Psi(0)\rangle_s & t > 0 \end{cases} \quad \text{gilt.} \quad (5.5)$$

5.2 Anwendung auf einen Energieeigenzustand

Nun wird ein einzelner Eigenzustand betrachtet, d. h. alle folgenden Größen sind als "Größe pro Zustand" anzusehen. Zum Schluß wird dann über alle besetzten Zustände integriert.

Es sei der Zustand $|k, 0\rangle_s$ zum Zeitpunkt $t = t_0$ besetzt, also gelte:

$$|\Psi(k, t_0)\rangle_s = |k, 0\rangle_s.$$

Verwendet man die Identität:

$$[\hat{H}_s(\tau)]^n = \int dk' E^n(k') |k', \tau\rangle_s \langle k', \tau|, \quad (5.6)$$

die sich durch die Definition von $\hat{H}_s(\tau)$ und mit vollständiger Induktion zeigen läßt, so kann man mit der folgenden Fallunterscheidung zu $|\Psi(k, \tau)\rangle_s$ gelangen:

1. Fall: $t \leq 0$:

$$|\Psi(k, t)\rangle_s = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(0)(t-t_0)\right\}|k, 0\rangle_s = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_0)\right\}|k, 0\rangle_s, \quad (5.7)$$

das heißt, der ursprüngliche Zustand wird für $t \leq 0$ nur durch einen Phasenfaktor geändert.

2. Fall: $t > 0$:

$$|\Psi(k, t)\rangle_s = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_s(\tau_0)t - E(k)t_0]\right\}|k, 0\rangle_s.$$

Mit der Reihenentwicklung für die Exponentialfunktion, der Vertauschung von Summation und Integration und mit (5.6) erhält man:

$$\begin{aligned} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(\tau_0)t\right\} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(\tau_0)t\right\}^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{-\frac{i}{\hbar}t\right\}^n \int dk' E^n(k') |k', \tau_0\rangle_s \langle k', \tau_0| \\ &= \int dk' \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{-\frac{i}{\hbar}E(k')t\right\}^n \right] |k', \tau_0\rangle_s \langle k', \tau_0| \\ &= \int dk' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E(k')t\right\} |k', \tau_0\rangle_s \langle k', \tau_0|, \end{aligned}$$

was dann für $|\Psi(k, t)\rangle_s$ das Folgende bedeutet:

$$|\Psi(k, t)\rangle_s = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}E(k)t_0\right\} \int dk' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E(k')t\right\} \langle k', \tau_0|k, 0\rangle_s |k', \tau_0\rangle_s. \quad (5.8)$$

Zusammenfassung

Faßt man beide Fälle zusammen, so ergibt sich $|\Psi(k, t)\rangle_s$ zu:

$$|\Psi(k, t)\rangle_s = \int dk' \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} [E(k')t - E(k)t_0]\right\} {}_s\langle k', \theta(t) \tau_0 | k, 0 \rangle_s |k', \theta(t) \tau_0\rangle_s, \quad (5.9)$$

wodurch die zeitliche Entwicklung des Zustands $|k, 0\rangle_s$ bestimmt ist.

5.3 Der Wahrscheinlichkeitsstrom

Für ein Teilchen, das sich zum Zeitpunkt t_0 im Zustand $|k, 0\rangle_s$ befindet, ist die relative Wahrscheinlichkeit pro Zustand, es zum Zeitpunkt t am Ort r_l zu finden, durch

$$\rho_s(r_l, k, t) = |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_s|^2 \quad \text{gegeben.} \quad (5.10)$$

Um zu berechnen, welcher Strom nach Einschalten des Transfers über die Kontaktstelle fließt, gilt es nun, einen Zusammenhang zwischen Wahrscheinlichkeitsstrom und Wahrscheinlichkeit herzustellen: Sei

$$j_s(r_l, k, t)$$

der Wahrscheinlichkeitsstrom, der zwischen $(l-1)$ -ten und l -ten Platz fließt. Verwendet man die Richtungskonvention, daß $j_s(r_l, k, t)$ positiv ist, wenn die Wahrscheinlichkeit von r_{l-1} nach r_l fließt und bedient man sich dem Prinzip der lokalen Erhaltung der Wahrscheinlichkeit, so erhält man:

$$\frac{\partial \rho_s(r_l, k, t)}{\partial t} + j_s(r_{l+1}, k, t) - j_s(r_l, k, t) = 0. \quad (5.11)$$

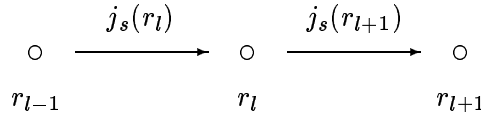


Abbildung 5.1: Wahrscheinlichkeitsstrom durch eine lineare Kette

Man kann nun durch Summation über die Gleichung (5.11) den Strom durch den Kontakt berechnen.

Summiert man über das rechte Reservoir, so erhält man:

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_s|^2 + j_s(r_{l+1}, k, t) - j_s(r_l, k, t) \right\} &= 0 \\ \Leftrightarrow j_s(r_1, k, t) - j_s(r_{\infty}, k, t) &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_s|^2. \end{aligned}$$

Vom “unendlichen” fließe nichts in die Reservoirs, was bedeutet, daß

$$j_s(r_{\pm\infty}, k, t) = 0 \quad \text{ist.} \quad (5.12)$$

Für Modell 1 steht somit der Strom über den Kontakt fest, für Modell 2 verwendet man (5.11), um den Strom vom linken Reservoir zur Kontaktstelle zu berechnen.

$$\frac{\partial}{\partial t} |\langle r_0 | \Psi(k, t) \rangle_2|^2 = j_2(r_0, k, t) - j_2(r_1, k, t).$$

Aus analogen Betrachtungen für das linke Reservoir synthetisiert man:

$$\begin{aligned}
j_s(r_1, k, t) &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_s|^2 = - \sum_{l=-\infty}^0 \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_s|^2 \\
j_2(r_0, k, t) &= j_2(r_1, k, t) + \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_0 | \Psi(k, t) \rangle_2|^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_2|^2 \\
&= - \sum_{l=-\infty}^{-1} \frac{\partial}{\partial t} |\langle r_l | \Psi(k, t) \rangle_2|^2.
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Eine weitere Größe, die für die späteren Betrachtungen wichtig wird, ist:

$$\rho_2(r_0, k, t) = |\langle r_0 | \Psi(k, t) \rangle_2|^2. \tag{5.14}$$

Bevor nun mit der Berechnung von $j_s(r_1, k, t)$ begonnen wird, soll an dieser Stelle noch eine grundsätzliche Bemerkung gemacht werden:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Für } 0 < k < \frac{\pi}{a} \\ \text{und für } -\frac{\pi}{a} < k < 0 \end{array} \right\} \text{ ist } \langle r_l | k, 0 \rangle_s = c_{l,s}(k, 0) = 0 \quad \text{falls } \begin{cases} l \geq 1 \\ l \leq 0 \end{cases}.$$

Wählt man für positive k die Summation über positive l und für negative k die Summation über nicht positive l , so kann die Berechnung von $j_s(r_1, k, t > 0)$ leichter durchführbar sein, als wenn man die andere, nach (5.13) ebenfalls mögliche Summation wählt. Der Grund hierfür ist darin zu suchen, daß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen für $t \leq 0$ im entsprechenden Reservoir zu finden, Null ist. Man betrachtet also nur das, was nach Einschalten des Transfers in dieses Reservoir transmittiert wird.

Zu guter Letzt wird noch die Formel für den Strom angegeben und derselbe für $t \leq 0$ berechnet.

Wenn k ein ausgedehnter Zustand ist, werden wir später nur den Fall $k > 0$ betrachten. Deswegen wird die Summation wie untenstehend gewählt. Nach (5.13) und (5.9) ergibt sich:

$$j_s(r_1, k, t) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \left| \int dk' \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(k') t \right\} {}_s \langle k', \theta(t) \tau_0 | k, 0 \rangle_s \langle r_l | k', \theta(t) \tau_0 \rangle_s \right|^2. \tag{5.15}$$

Für $t \leq 0$ gilt:

$$|\langle r_l | \Psi(k, t \leq 0) \rangle_s|^2 = \left| \int dk' \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(k') t \right\} \delta(k' - k) \langle r_l | k', 0 \rangle_s \right|^2 = |\langle r_l | k', 0 \rangle_s|^2,$$

also ist $\rho_s(r_l, k, t \leq 0)$ unabhängig von t , und es gilt:

$$j_s(r_1 = a, k, t \leq 0) = 0 \tag{5.16}$$

Der Fall $t > 0$ wird im nächsten Kapitel diskutiert. Dort werden dann ebenfalls gebundene Zustände behandelt.

Kapitel 6

Berechnung des Stromes

Die Werte von τ_0 seien eingeschränkt auf:

- $\tau_0 \neq 0$, ansonsten liegt der im letzten Abschnitt betrachtete Fall vor.
- $\tau_0^2 < 1$, also ist der Transport über die Kontaktstelle behindert.

Möchte man den Strom dadurch berechnen, daß man die Wellenfunktion $\langle r_l | \Psi(k, t > 0) \rangle_s$ für jeden beliebigen Ort r_l bestimmt, so verursacht der Index l Unannehmlichkeiten. Deshalb zieht man die Summation unter die Integrale und erhält mit (5.15):

$$j_s(a, k, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int dk' dk'' \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [E(k') - E(k'')] t \right\} {}_s \langle k', \tau_0 | k, 0 \rangle_s {}_s \langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_s \right. \\ \left. \times \left[\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s \right] \right\}. \quad (6.1)$$

Nach der Einführung der Abkürzung

$$W(k, t) := \frac{E(k) t}{\hbar}, \quad (6.2)$$

und nach der Aufspaltung in ausgedehnte und gebundene Zustände erhält man:

$$j_s(a, k, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k', t)} {}_s \langle k', \tau_0 | k, 0 \rangle_s \right. \\ \times \left(\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} {}_s \langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_s \left[\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s \right] \right) \\ + 2\Re \left[\sum_{\beta} \theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda \beta) e^{-iW(k_{\beta}, t)} {}_s \langle k_{\beta}, \tau_0 | k, 0 \rangle_s \right. \\ \times \left. \left(\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} {}_s \langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_s \left[\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k_{\beta}, \tau_0 \rangle_s \right] \right) \right] \\ + 2\Re \left[\theta(\tau_0^2 - 1 - \lambda) \theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda) e^{-i[W(k_{-1}, t) - W(k_1, t)]} \right. \\ \left. \times {}_s \langle k_{-1}, \tau_0 | k, 0 \rangle_s {}_s \langle k, 0 | k_1, \tau_0 \rangle_s \left[\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k_1, \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k_{-1}, \tau_0 \rangle_s \right] \right] \left. \right\} \\ = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{j=1}^3 \varrho_{s,R,j}(k, t),$$

wobei s das Modell und R das rechte Reservoir bezeichnet. Im Modell $s = 1$, also ohne ausgezeichnete Stelle tritt wegen der Einschränkung der Werte von τ_0 nur $\varrho_{1,R,1}$ auf, im Modell $s = 2$ (= Modell mit ausgezeichneter Stelle) tritt aus gleichem Grund $\varrho_{2,R,3}$, in dem übrigens die zeitunabhängigen Terme weggelassen wurden, nicht auf. Um Gleichung (6.3) übersichtlicher zu gestalten, führt man die folgende Bezeichnung ein:

$$I_s(k, k', t) = \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} {}_s\langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_s \left[\sum_{l=1}^{\infty} {}_s\langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle \right]. \quad (6.4)$$

Möchte man $\rho_2(r_0 = 0, k, t)$ berechnen, so kann man in (6.3)

$$\sum_{l=1}^{\infty} {}_s\langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s \quad \text{durch} \quad {}_s\langle k'', \tau_0 | r_0 \rangle \langle r_0 | k', \tau_0 \rangle_s$$

ersetzen, und erhält:

$$\begin{aligned} \rho_2(0, k, t) &= |\varrho_{2,0,1}(k, t)|^2 + 2\Re \sum_{\beta} [\varrho_{2,0,1}(k, t) \cdot \varrho_{2,0,2}(k, t)] + \sum_{\beta} |\varrho_{2,0,2}(k, t)|^2, \quad \text{wobei} \\ \varrho_{2,0,1}(k, t) &= \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} {}_2\langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_2 {}_2\langle k'', \tau_0 | r_0 \rangle \quad \text{und} \\ \varrho_{2,0,2}(k, t) &= \theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) e^{-iW(k_{\beta}, t)} {}_2\langle k_{\beta}, \tau_0 | k, 0 \rangle_2 \langle r_0 | k_{\beta}, \tau_0 \rangle_2 \quad \text{gilt.} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Der 2. Index bezeichnet hierbei die Stelle $j = 0$.

6.1 Bestimmung der Komponenten

Nun werden die einzelnen Bestandteile der $\varrho_{s,R,j}$ bzw. $\varrho_{s,0,j}$ genauer betrachtet:

Neben der Exponentialfunktion tritt noch:

- das Skalarprodukt ${}_s\langle k, 0 | k'', \tau_0 \rangle_s$ eines Zustands mit $\tau = \tau_0$ mit einem Zustand mit $\tau = 0$,
- das Matricelement:

$$\sum_{l=1}^{\infty} {}_s\langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s = P_{s,R}(k'', k', \tau_0)$$

des Projektionsoperators $\hat{P}_R = \sum_{l=1}^{\infty} |r_l\rangle \langle r_l|$ bezüglich der Basis $\{|k, \tau_0\rangle\}$ und

- die Wellenfunktion $\langle r_0 | k', \tau_0 \rangle_2 = c_{0,2}(k', t)$ auf.

Der Operator \hat{P}_R projiziert dabei auf das rechte Reservoir.

6.1.1 Das Skalarprodukt

Es werden die folgenden Fälle untersucht:

1. Fall: k ist ausgedehnter Zustand

Durch Einfügen des Einheitsoperators ergibt sich:

$${}_s\langle k, 0|k'', \tau_0\rangle_s = \sum_{j=-\infty}^{\infty} {}_s\langle k, 0|r_j\rangle\langle r_j|k'', \tau_0\rangle_s = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{j,s}^*(k, 0) c_{j,s}(k'', \tau_0).$$

Unter Verwendung von (3.15) und (3.34) erhält man:

- 1.1. Fall: Ist k'' Blochzustand, so liefern die Gleichungen (3.11), (3.12), (3.28) und (3.29):

$${}_s\langle k, 0|k'', \tau_0\rangle_s = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{\infty} \vec{e}_j^T(k, k'') \mathbf{M}_{3,s}(k'', \tau_0) \vec{\theta}(k, k'') e^{i(k-k'')a(s-2)\theta(k)} \quad \text{mit}$$

$$\mathbf{M}_{3,s}(k'', \tau_0) = \tag{6.6}$$

$$\begin{pmatrix} e^{2ik''a(s-2)} A_{s,L}(k'', \tau_0) & 0 & -B_{s,L}(k'', \tau_0) & -1 \\ 1 & B_{s,R}(k'', \tau_0) & 0 & -A_{s,R}(k'', \tau_0) \\ -e^{2ik''a(s-2)} A_{s,L}(k'', \tau_0) & 0 & B_{s,L}(k'', \tau_0) & 1 \\ -1 & -B_{s,R}(k'', \tau_0) & 0 & A_{s,R}(k'', \tau_0) \end{pmatrix}$$

mit $\vec{e}_j(k, k'')$ und $\vec{\theta}(k, k'')$ gemäß (4.4).

- 1.2. Fall: k_β ist lokalisierter Zustand. Dann gilt nach (3.43):

$${}_2\langle k, 0|k_\beta, \tau_0\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{N \cdot N_{g,2,\beta}(\tau_0, \lambda)}} \sum_{j=1}^{\infty} \vec{e}_j^T(k, k_\beta) \mathbf{M}_3^{(0)} \vec{\theta}(k), \tag{6.7}$$

$$\text{mit } \mathbf{M}_3^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\theta}(k) = \begin{pmatrix} \theta(k) \\ \theta(-k) \end{pmatrix}.$$

2. Fall: k ist gebundener Zustand

Nur für $s = 2$ kann k ein lokalisierter Zustand sein, und es ergibt sich: $|0, 0\rangle_2 = |r_0\rangle$. Deshalb werden damit gleichzeitig die Wellenfunktionen bestimmt.

- k'' ist Blochzustand:

$${}_2\langle 0, 0|k'', \tau_0\rangle_2 = c_{0,2}(k'', \tau_0) = \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} B_2(|k''|, \tau_0), \tag{6.8}$$

- k_β ist gebundener Zustand:

$${}_2\langle 0, 0|k_\beta, \tau_0\rangle_2 = c_{0,2}(k_\beta, \tau_0) = \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N_{g,2,\beta}(\tau_0, \lambda)}}. \tag{6.9}$$

6.1.2 Das Matricelement

Es gilt:

$$\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s = \sum_{l=1}^{\infty} c_{l,s}^*(k'', \tau_0) c_{l,s}(k', \tau_0).$$

Hier sind zwei Fälle zu unterscheiden:

1. Fall: k', k'' sind ausgedehnte Zustände

Analog zum Vorhergehenden erhält man:

$$\sum_{l=1}^{\infty} {}_s \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k', \tau_0 \rangle_s = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{\infty} \vec{e}_l^T(k', k'') M_{4,s}(k', k'', \tau_0) \vec{\theta}(k', k''), \quad \text{wobei} \quad (6.10)$$

$$M_{4,s}(k', k'', \tau_0) = \begin{pmatrix} 0 & A_{s,R}(-k'', \tau_0) B_{s,L}(k', \tau_0) & 0 & A_{s,R}(-k'', \tau_0) \\ B_{s,L}(-k'', \tau_0) B_{s,L}(k', \tau_0) & B_{s,L}(k', \tau_0) & B_{s,L}(-k'', \tau_0) & 1 \\ 0 & 0 & 0 & A_{s,R}(-k'', \tau_0) A_{s,R}(k', \tau_0) \\ 0 & 0 & B_{s,L}(-k'', \tau_0) A_{s,R}(k', \tau_0) & A_{s,R}(k', \tau_0) \end{pmatrix}.$$

2. Fall: k_β ist lokalisierter, k'' ist Blochzustand

$$\sum_{l=1}^{\infty} {}_2 \langle k'', \tau_0 | r_l \rangle \langle r_l | k_\beta, \tau_0 \rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{N \cdot N_{g,2,\beta}(\tau_0, \lambda)}} \sum_{l=1}^{\infty} \vec{e}_l^T(k_\beta, k'') M_5(k'', \tau_0) \vec{\theta}(k''), \quad \text{mit} \quad (6.11)$$

$$M_5(k'', \tau_0) = \begin{pmatrix} 0 & A_{2,R}(-k'', \tau_0) \\ B_{2,L}(-k'', \tau_0) & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

6.1.3 Die Einführung von \vec{S}

Bei der Berechnung der Komponenten tauchen Summationen über j auf, die nur auf den Vektor \vec{e}_j wirken. Deshalb wird die Summe in jede Komponente des Vektors hineingezogen und ergibt gemäß (A.24):

$$\sum_{j=1}^{\infty} \vec{e}_j(k, k'') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} S(k + k'', \epsilon) \\ S(k - k'', \epsilon) \\ S(-k + k'', \epsilon) \\ S(-k - k'', \epsilon) \end{pmatrix} =: \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \vec{S}(k, k'', \epsilon). \quad (6.12)$$

- Ist ein Argument von \vec{S} komplex, so treten nur die sowieso konvergenten Komponenten auf. Für diese kann der Grenzwert ($\epsilon \rightarrow 0$) sofort berechnet werden.
- Sind alle Argumente reell, so wird Integration und Grenzwertbildung vertauscht.

Im nächsten Abschnitt wird $I_s(k, k', t)$ für jede Kombination von ausgedehnten und gebundenen k und k' separat behandelt.

6.2 Zerlegung von $I_s(k, k', t)$

Im folgenden werden in Argumenten von Funktionen auftauchende τ_0 weggelassen, da im Moment keine Verwechslungsgefahr mit anderen τ -Werten besteht.

Es sind vier Fälle zu unterscheiden:

In jedem Fall wird die Integration über das Intervall von $-\frac{\pi}{a}$ bis $\frac{\pi}{a}$ auf das Intervall von 0 bis $\frac{\pi}{a}$ zurückgeführt und der Integrand auf einheitliche Struktur gebracht. Die genaue Vorgehensweise entnehme man Anhang C.1.

6.2.1 k ist Blochzustand

Zur Vereinfachung wird nun $0 < k < \frac{\pi}{a}$ angenommen.

1. Fall: k' ist ausgedehnter Zustand

Nun gilt:

$$\begin{aligned} I_s(k, k', t) &= \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} e^{i(k-k'')a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \mathbf{M}_{3,s}(k'') \vec{\theta}(k, k'') \right\} \\ &\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \mathbf{M}_{4,s}(k', k'') \vec{\theta}(k', k'') \right\} \\ &= \frac{e^{ika(s-2)}}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \\ &\quad \times \left\{ \theta(k') \mathbf{X}_{1,s}(k', k'') + \theta(-k') \mathbf{X}_{2,s}(k', k'') \right\} \cdot \vec{S}(k', k'', \epsilon_3) \end{aligned}$$

mit:

$$\mathbf{X}_{1,s}(k', k'') = B_s(k') \mathbf{X}_{3,s}(k'') \quad \text{und} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{2,s}(k', k'') &= e^{-ik''a(s-2)} \times \\ &\times \begin{pmatrix} e^{2ik''a(s-2)} B_s(k'') & 0 & e^{2ik''a(s-2)} B_s(k'') A_{s,R}(k') & 0 \\ 0 & B_s(-k'') & 0 & B_s(-k'') A_{s,R}(k') \\ -e^{2ik''a(s-2)} B_s(k'') & 0 & -e^{2ik''a(s-2)} B_s(k'') A_{s,R}(k') & 0 \\ 0 & -B_s(-k'') & 0 & -B_s(-k'') A_{s,R}(k') \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

2. Fall: $k' = k_\beta$ ist gebundener Zustand

$$\begin{aligned} I_2(k, k_\beta, t) &= \frac{1}{\sqrt{N^3 \cdot N_{g,2,\beta}}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \mathbf{M}_{3,2}(k'') \vec{\theta}(k, k'') \right\} \\ &\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k_\beta, k'', 0) \mathbf{M}_{5,2}(k'') \vec{\theta}(k'') \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N^3 \cdot N_{g,2,\beta}}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \mathbf{X}_{3,2}(k'') \vec{S}(k_\beta, k'', 0), \end{aligned}$$

mit:

$$\mathbf{X}_{3,s}(k'') = \begin{pmatrix} e^{ik''a(s-2)} B_s(k'') & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik''a(s-2)} B_s(-k'') & 0 & 0 \\ -e^{ik''a(s-2)} B_s(k'') & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{-ik''a(s-2)} B_s(-k'') & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

6.2.2 $k = 0$ ist gebundener Zustand

Im Integrand taucht in den einzelnen Summanden nur eine Komponente von S_j auf, d.h. es genügt, die Vektoren \vec{U} einzuführen.

1. Fall: k' ist ausgedehnter Zustand

$$\begin{aligned}
 I_2(0, k', t) &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N^3}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(|k''|) \vec{S}^T(k', k'', \epsilon) \mathbf{M}_{4,2}(k', k'') \vec{\theta}(k', k'') \\
 &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N^3}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(k'') \vec{S}^T(k', k'', \epsilon) \\
 &\quad \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k'') + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k'') \right\}
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

mit:

$$\vec{U}_1(k', k'') = B_2(k') \vec{U}_3(k'') \quad \text{und}$$

$$\vec{U}_2(k', k'') = \begin{pmatrix} 1 \\ 2B_2(-k'') - 1 \\ A_{2,R}(k') \\ A_{2,R}(k') [2B_2(-k'') - 1] \end{pmatrix}.$$

2. Fall: $k' = k_\beta$ ist lokalisierter Zustand

$$\begin{aligned}
 I_2(0, k_\beta, t) &= \frac{1}{N \sqrt{N_{g,2,\beta}}} \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(|k''|) \vec{S}^T(k_\beta, k'', 0) \mathbf{M}_{5,2}(k'') \vec{\theta}(k'') \\
 &= \frac{1}{N \sqrt{N_{g,2,\beta}}} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(k'') \vec{S}^T(k_\beta, k'', 0) \vec{U}_3(k'')
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

mit: $\vec{U}_3(k'') = \begin{pmatrix} 1 \\ 2B_2(-k'') - 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$

6.3 Zerlegung von $\varrho_{2,0,1}(k, t)$

Man geht analog zum vorherigen Abschnitt vor, unterscheidet allerdings nur zwei Fälle und erhält:

6.3.1 1. Fall: k ist propagierender Zustand

$$\begin{aligned}
 \varrho_{2,0,1}(k, t) &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N^3}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(-|k''|) \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \mathbf{M}_{3,2}(k'') \vec{\theta}(k', k'') \\
 &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N^3}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(-k'') \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \vec{U}_4(k'') \quad \text{mit: (6.17)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{U}_4(k'') &= \vec{M}_{3,2,2}(-k'') + \vec{M}_{3,2,1}(k'') \\ &= \begin{pmatrix} 2B_2(k'') - 1 \\ 1 \\ 2B_2(k'') - 1 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

6.3.2 2. Fall: $k = 0$ ist gebundener Zustand

$$\begin{aligned}\varrho_{2,0,1}(0, t) &= \frac{1}{\tau_0^2 N} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} |B_2(|k''|)|^2 \\ &= \frac{2}{\tau_0^2 N} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} |B_2(k'')|^2.\end{aligned}\quad (6.18)$$

6.4 Zusammenhang mit dem Residuensatz

Gegenstand weiterer Betrachtungen sind Integrale der Form:

$$\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' J(k, k', k'', t, \epsilon_2, \epsilon_3) = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} S(\pm k \pm k'', \epsilon_2) S(\pm k' \pm k'', \epsilon_3) f(k', k''). \quad (6.19)$$

Die direkte Berechnung scheitert daran, daß $\cos k'' a$ im Argument der Exponentialfunktion steht.

Für beliebige Zeiten t gestaltet sich die Durchführung der Integration als schwierig, für große Zeiten ($t \rightarrow \infty$) eröffnet sich allerdings eine Möglichkeit:

Man schließt obiges Integral mit Hilfe eines Weges Υ , der durch die komplexe Ebene führt. Dabei wählt man Υ so, daß für große Zeiten der Integrand auf Spur Υ (ausgenommen Anfangs- und Endpunkt) verschwindet, also:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} J(k, k', \Upsilon(u), t, \epsilon_2, \epsilon_3) = 0,$$

und damit das Integral für große Zeiten im wesentlichen durch die Residuen von J bestimmt ist.

6.4.1 Festlegung des Weges Υ

Zunächst sollte bestimmt werden, ob Υ durch die positive oder negativ imaginäre Halbebene läuft.

Wenn das Wegintegral für große Zeiten verschwinden soll, so muß für komplexes $k = k_r + ik_i$ gelten:

$$\begin{aligned}0 \geq \Re [iW(k, t)] &= \frac{2Vt}{\hbar} \Re [i \cos ka] = \frac{2Vt}{\hbar} \Re [i(\cos k_r a \cosh k_i a - i \sin k_r a \sinh k_i a)] \\ \Leftrightarrow &0 \geq \sin k_r a \sinh k_i a.\end{aligned}\quad (6.20)$$

Für $0 < k_r < \frac{\pi}{a}$ sollte also $k_i \leq 0$ sein; der Weg verläuft also in der negativen imaginären Halbebene.

Für die k' -Integration weist der Exponent das umgekehrte Vorzeichen auf, und man kann analog folgern, daß dann $k_i \geq 0$ gelten muß.

Deshalb definiert man die Wege Υ_+ und Υ_- folgendermaßen:

$$\Upsilon_{\pm} : \begin{cases} [0, \pi] & \rightarrow \mathcal{C} \\ u & \mapsto \Upsilon_{\pm}(u) = \frac{\pi}{2a} (1 + e^{\pm iu}) \quad \Upsilon'_{\pm}(u) = \pm i \frac{\pi}{2a} e^{\pm iu} \end{cases}, \quad (6.21)$$

womit obige Forderungen erfüllt sind.

Sei G_{\pm} das von Υ_{\pm} und der reellen Achse berandete Gebiet.

6.4.2 Polstellen des Integranden

- Die Exponentialfunktion weist keine Polstellen auf.
- Für den Nenner von $S(k + k'', \epsilon)$ gilt:

$$1 - e^{i(k+k'')a} e^{-\epsilon} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad k'' = -k - i \frac{\epsilon}{a}; \quad (6.22)$$

für $-\frac{\pi}{a} < k < 0$ liegt ab einem genügend kleinen $\epsilon > 0$ der Pol innerhalb von G_- .

- Da $\Im[k_{\beta}] \neq 0$ und $\Re[k_{\beta}] = \frac{n\pi}{a}$, $n = 0, 1$ ist, liegt der Pol der Funktion $S(k_{\beta} + k'', 0)$ außerhalb von G_{\pm} .
- Der Nenner von $f(k', k'')$ besteht aus dem Nenner von $B_s(k'')$ und/oder dessen konjugiert Komplexen (= B_s mit negiertem Argument).

Auftretende Nenner für $s = 1$:

$$\begin{aligned} \tau_0^2 e^{ika} - e^{-ika} = 0 & \Leftrightarrow \tau_0^2 = e^{-2ik_r a} e^{2k_i a} \\ & \Leftrightarrow k_r = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathcal{Z} \quad \text{und} \quad |\tau_0| = e^{|k_i| a}, \end{aligned}$$

für $k_i \neq 0$ liegen die Polstellen außerhalb von G_{\pm} .

Für $k_i = 0 \Leftrightarrow \tau_0^2 = 1$ kürzen sich Zähler und Nenner weg, also liegt dann eine hebbare Singularität vor (wird später nicht weiter verfolgt).

Für $s = 2$:

$$\begin{aligned} 2\lambda - (1 - 2\tau_0^2) e^{ika} - e^{-ika} &= 0 \\ \Leftrightarrow \begin{cases} 2\lambda - [e^{k_i a} + (1 - 2\tau_0^2) e^{-k_i a}] \cos k_r a &= 0 \\ [e^{k_i a} - (1 - 2\tau_0^2) e^{-k_i a}] \sin k_r a &= 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Zusätzlich zu den in Abschnitt 3.3.2 erwähnten Fällen ergibt sich daraus insgesamt:

$$\begin{aligned} \text{1.Fall:} \quad k_r &= 0, \quad 2\lambda - [e^{k_i a} + (1 - 2\tau_0^2) e^{-k_i a}] &= 0 \\ \text{2.Fall:} \quad k_r &= \frac{\pi}{a}, \quad 2\lambda + [e^{k_i a} + (1 - 2\tau_0^2) e^{-k_i a}] &= 0 \\ \text{3.Fall:} \quad e^{2k_i a} &= 1 - 2\tau_0^2, \quad 0 < \tau_0^2 < \frac{1}{2}, \quad \cos k_r a &= \frac{\lambda}{\sqrt{1 - 2\tau_0^2}}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Im 1. und 2. Fall liegen für $k_i \neq 0$ auch hier die Polstellen außerhalb von G_{\pm} , für $k_i = 0$ ergibt sich eine hebbare Singularität (wird ebenfalls nicht genauer betrachtet).

Im 3. Fall ist k_i negativ und unter bestimmten Voraussetzungen für die Werte von λ und τ_0 kann es geschehen, daß in G_- eine Polstelle liegt.

6.4.3 Berechnung der Residuen

Wendet man den Residuensatz auf das vorgelegte Problem an, so erhält man:

$$\int_{\partial G_{\pm}} dk'' J(k, k', k'', t, \epsilon_2, \epsilon_3) = \pm 2\pi i \sum_{z \in G_{\pm}} \text{res}_z J. \quad (6.24)$$

Aus der Betrachtung der Polstellen des Integranden kann man J , auf dessen k'' -Abhängigkeit ab jetzt die Aufmerksamkeit gelenkt werden soll, folgendermaßen darstellen:

$$J(k'') = g(e^{ik''a}) \cdot e^{ik''a} \cdot \prod_{j=1}^n \frac{1}{e^{ik''a} - z_j}, \quad (6.25)$$

dabei habe g keine Pole; alle Pole seien im Produkt zusammengefaßt.

Durch Substitution erhält man einen Integranden, der Pole 1. Ordnung aufweist und dessen Residuen leicht berechnet werden können. Explizit geschieht das in Anhang C.2, wobei man auf folgendes Ergebnis stößt:

$$\int_{\partial G_{\pm}} dk'' g(e^{ik''a}) \cdot e^{ik''a} \cdot \prod_{j=1}^n \frac{1}{e^{ik''a} - z_j} = \pm N \sum_{k_l \in G_{\pm}} g(e^{ik_l a}) \cdot \prod_{j=1, j \neq l}^n \frac{1}{e^{ik_l a} - z_j}. \quad (6.26)$$

Da nicht alle Polstellen in G_+ oder G_- liegen, liefern nicht alle von Null verschiedenen Matricelemente der \mathbf{X} -Matrizen bzw. Komponenten der \vec{U} -Vektoren Beiträge zum Residuum. Genauere Betrachtungen dazu sind ebenfalls in Anhang C.2 verzeichnet. Man erhält schließlich die Aussage, daß:

- nur die 3. Reihe der \mathbf{X} -Matrizen,
- die 3. Spalte von $\mathbf{X}_{1,s}$, die 1. Spalte von $\mathbf{X}_{2,s}$,
- die 3. Komponente von \vec{U}_1 und \vec{U}_4 und die 1. Komponente von \vec{U}_2

einen Beitrag liefern.

Was jetzt noch zu tun bleibt, ist in jedem Einzelfall, in dem ein Residuum vorkommt, die Funktion g zu bestimmen.

6.5 Ausführen der k'' -Integration

Nach den bis zum jetzigen Zeitpunkt vollbrachten Vorarbeiten kann nun die Integration über k'' in den einzelnen Fällen durchgeführt werden, d. h. die in den Gleichungen (6.4) und (6.5) eingeführten I_s bzw. $\varrho_{2,0,1}$ werden nun berechnet.

Nach (6.24) gilt:

$$\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' J(k'') = -2\pi i \sum_{z \in G_-} \text{res}_z J - \int_{\Gamma_-} dk'' J(k''). \quad (6.27)$$

$\varrho_{2,0,1}$ und I_s lassen sich in drei Anteile zerlegen:

$$\begin{aligned} \varrho_{2,0,1} &= \varrho_{2,0,1}^{(S)} + \varrho_{2,0,1}^{(\Delta)} + \varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)} \\ I_s &= I_s^{(S)} + I_s^{(\Delta)} + I_s^{(\Upsilon)}, \quad \text{wobei} \end{aligned} \quad (6.28)$$

$\varrho_{2,0,1}^{(S)}, I_s^{(S)}$ die von den Residuen von S , S gemäß (6.12)
 $\varrho_{2,0,1}^{(\Delta)}, I_s^{(\Delta)}$ die von dem Residuum von $B_2(k'')$ und
 $\varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}, I_s^{(\Upsilon)}$ die von der Integration entlang des Weges Υ_- herrührende Anteile
sind.

Dadurch daß der Integrand von $\varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}$ und $I_s^{(\Upsilon)}$ mit den entsprechenden Integranden aus Abschnitt 6.2 und 6.3 übereinstimmt, lassen sich diese Terme leicht angeben.

Der Gegenstand der nachfolgenden Betrachtungen sollen die Polstellen von S sein, d. h. vorab wird die eventuell auftretende Polstelle von $B_2(k'')$, der konjugiert Komplexen oder dem Betragsquadrat untersucht.

Die Polstelle kann in G_- liegen, wenn der Integrand $B_2(k'')$ enthält; sie kann in G_+ liegen, falls $B_2(-k'')$ vorhanden ist.

Sei $k_p = k_r + ik_i$ die Polstelle von $B_2(k'')$ mit $k_r > 0$. Dann lautet, falls k_p in G_- liegt, für

$$\int_{\partial G_-} dk'' B_2(k'') f(k'')$$

der Beitrag zum Residuum

$$F^{(\Delta)} = N f(k_p) \frac{\sin k_p a}{(1 - 2\tau_0^2) e^{-k_i a} \sin k_r a} = N f(k_p) B_{\text{res}}(k_p). \quad (6.29)$$

Liegt die Polstelle auf Υ_- , so wird Υ_- so modifiziert, daß der Pol innerhalb von G_- liegt. Deshalb kann man schreiben:

$$F^{(\Delta)} = \Delta^-(k_p) N f(k_p) B_{\text{res}}(k_p), \quad \text{mit} \quad \Delta^\pm(k_p) = \begin{cases} 1 & k_p \text{ liegt in } G_\pm \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (6.30)$$

6.5.1 Der Zustand $k = 0$

- Für $\varrho_{2,0,1}$ kann nur $B_2(k'')$ eine Polstelle enthalten, also:

$$\begin{aligned} \varrho_{2,0,1}(0, t) &= \frac{2}{\tau_0^2} \left[\Delta^-(k_p) e^{iW(k_p, t)} B_2(-k_p) B_{\text{res}}(k_p) - \frac{1}{N} \int_{\Upsilon_-} dk'' e^{iW(k'', t)} |B_2(k'')|^2 \right] \\ &= \varrho_{2,0,1}^{(\Delta)}(0, t) + \varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}(0, t). \end{aligned} \quad (6.31)$$

- Für I_2 mit zusätzlichem gebundenen $k' = k_\beta$ gilt analoges:

$$\begin{aligned} I_2(0, k_\beta, t) &= \frac{1}{\sqrt{N_{g,2,\beta}}} \left[\Delta^-(k_p) e^{iW(k_p, t)} B_{\text{res}}(k_p) \vec{S}^T(k_\beta, k_p, 0) \vec{U}_3(k_p) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{N} \int_{\Upsilon_-} dk'' e^{iW(k'', t)} B_2(k'') \vec{S}^T(k_\beta, k'', 0) \vec{U}_3(k'') \right] \\ &= I_2^{(\Delta)}(0, k_\beta, t) + I_2^{(\Upsilon)}(0, k_\beta, t). \end{aligned} \quad (6.32)$$

- Für I_2 mit ausgedehntem k' bleibt vom Skalarprodukt ein Term übrig, nämlich

$$\theta(-k') B_2(k'') S^{(1)}(k', k'', \epsilon) U_2^{(1)}(k', k'') = \theta(-k') B_2(k'') S(k' + k'', \epsilon).$$

Nach Vorziehen von $\theta(-k')$ vors Integral erhält man für g :

$$g(e^{ik''a}) = -e^{iW(k'',t)} B_2(k''), \quad z_1 = e^{-ik'a} e^\epsilon,$$

was gemäß (6.26) zum folgenden führt:

$$\begin{aligned} I_2(0, k', t) &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\theta(-k') \exp \left\{ iW \left(-k' - i \frac{\epsilon}{a}, t \right) \right\} B_2 \left(-k' - i \frac{\epsilon}{a} \right) \right. \\ &\quad + \Delta^-(k_p) e^{iW(k_p,t)} B_{\text{res}}(k_p) \vec{S}^T(k', k_p, \epsilon) \\ &\quad \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k_p) + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k_p) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{N} \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} B_2(k'') \vec{S}^T(k', k'', \epsilon) \\ &\quad \left. \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k'') + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k'') \right\} \right] \\ &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} \left[\theta(-k') e^{iW(-k',t)} B_2(-k') \right. \\ &\quad + \Delta^-(k_p) e^{iW(k_p,t)} B_{\text{res}}(k_p) \vec{S}^T(k', k_p, 0) \\ &\quad \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k_p) + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k_p) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} B_2(k'') \vec{S}^T(k', k'', \epsilon) \\ &\quad \left. \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k'') + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k'') \right\} \right] \\ &= I_2^{(S)}(0, k', t) + I_2^{(\Delta)}(0, k', t) + I_2^{(\Upsilon)}(0, k', t). \end{aligned} \quad (6.33)$$

6.5.2 k als propagierender Zustand

- Betrachtung von $\varrho_{2,0,1}$:

Auch in diesem Fall liefert vom Skalarprodukt nur ein Term ein Residuum:

$$B_2(-k'') S^{(3)}(k, k'', \epsilon) U_4^{(3)}(k'') = B_2(-k'') [2B_2(k'') - 1] S(-k + k'', \epsilon).$$

Damit beträgt g :

$$\begin{aligned} g(e^{ik''a}) &= -e^{iW(k'',t)} B_2(-k'') [B_2(k'') - 1], \quad z_1 = e^{ika} e^\epsilon, \quad \text{also} \\ \varrho_{2,0,1}(k, t) &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} \left[e^{iW(k,t)} B_2(-k) \{2B_2(k) - 1\} \right. \\ &\quad + 2\Delta^-(k_p) e^{iW(k_p,t)} B_2(-k_p) B_{\text{res}}(k_p) \{S(k + k_p, 0) + S(-k + k_p, 0)\} \\ &\quad \left. - \frac{1}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} B_2(-k'') \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \vec{U}_4(k'') \right] \\ &= \varrho_{2,0,1}^{(S)}(k, t) + \varrho_{2,0,1}^{(\Delta)}(k, t) + \varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}(k, t). \end{aligned} \quad (6.34)$$

- $k' = k_\beta$ ist gebunden:

Es bleibt nur die 3. Reihe der $\mathbf{X}_{3,2}$ -Matrix über, d. h. betrachtet werden muß:

$$S^{(3)}(k, k'', \epsilon) X_{3,2,1}^{(3)}(k'') S^{(1)}(k_\beta, k'', 0) = -S(-k + k'', \epsilon) B_2(k'') S(k_\beta + k'', 0).$$

Für g gilt:

$$\begin{aligned} g(e^{ik''a}) &= -e^{ik''a} e^{iW(k'',t)} B_s(k''), \quad z_1 = e^{ika} e^\epsilon, \quad z_2 = e^{-ik_\beta a}, \\ I_2(k, k_\beta, t) &= \frac{1}{\sqrt{N} \cdot N_{g,2,\beta}} \left[\frac{e^{ika}}{e^{ika} - e^{-ik_\beta a}} e^{iW(k,t)} B_2(k) \right. \\ &\quad + \Delta^-(k_p) e^{iW(k_p,t)} B_{\text{res}}(k_p) S(k_\beta + k_p, 0) \\ &\quad \times \{S(k + k_p, 0) - S(-k + k_p, 0)\} \\ &\quad \left. - \frac{1}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} \vec{S}^T(k, k'', \epsilon) \mathbf{X}_{3,2}(k'') \vec{S}(k_\beta, k'', 0) \right] \\ &= I_2^{(S)}(k, k_\beta, t) + I_2^{(\Delta)}(k, k_\beta, t) + I_2^{(\Upsilon)}(k, k_\beta, t). \end{aligned} \quad (6.35)$$

- k' ist Blochzustand:

Hier bleibt neben der 3. Reihe der Matrizen auch noch die 1. Spalte von $\mathbf{X}_{2,s}$ übrig, also insgesamt:

$$\begin{aligned} & -\theta(k') B_s(k') e^{ik''a(s-2)} B_s(k'') \cdot S(-k + k'', \epsilon_2) S(k' + k'', \epsilon_3) \\ & + \theta(-k') e^{ik''a(s-2)} B_s(k'') \cdot \left\{ -S(-k + k'', \epsilon_2) S(k' + k'', \epsilon_3) \right. \\ & \quad - A_{s,R}(k') S(-k + k'', \epsilon_2) S(-k' + k'', \epsilon_3) \\ & \quad \left. + S(k + k'', \epsilon_2) S(k' + k'', \epsilon_3) \right\}. \end{aligned}$$

Die zugehörigen Funktionen $g(e^{ik''a})$ lauten für alle vier Anteile:

$$C_s(k'', t) = g(e^{ik''a}) = e^{ik''a(s-1)} e^{iW(k'',t)} B_s(k''). \quad (6.36)$$

Die Unterscheidung geschieht durch k' -abhängige Vorfaktoren $h_j(k')$ und durch unterschiedliche z_j :

$$\begin{aligned} h_1(k') &= -\theta(k') B_s(k'); & z_1 &= e^{ika} e^{\epsilon_2} & z_2 &= e^{-ik'a} e^{\epsilon_3} \\ h_2(k') &= -\theta(-k'); & z_1 &= e^{ika} e^{\epsilon_2} & z_2 &= e^{-ik'a} e^{\epsilon_3} \\ h_3(k') &= -\theta(-k') A_{s,R}(k'); & z_1 &= e^{ika} e^{\epsilon_2} & z_2 &= e^{ik'a} e^{\epsilon_3} \\ h_4(k') &= \theta(k'); & z_1 &= e^{-ika} e^{\epsilon_2} & z_2 &= e^{-ik'a} e^{\epsilon_3} \end{aligned} \quad (6.37)$$

Nun wird die Berechnung nach (6.26) durchgeführt, einer der Grenzwerte berechnet und das ganze in eine überschaubare Darstellung gebracht. So erhält man (ausführlich in Anhang C.3):

$$\begin{aligned}
I_s(k, k', t) &= \frac{e^{ika(s-2)}}{N} \left[\delta_{s2} \Delta^-(k_p) e^{iW(k_p, t)} B_{\text{res}}(k_p) \{S(k + k_p, 0) - S(-k + k_p, 0)\} \right. \\
&\quad \times \left\{ \theta(k') B_2(k') S(k' + k_p, 0) \right. \\
&\quad \left. \left. + \theta(-k') [S(k' + k_p, 0) + A_{2,R}(k') S(-k' + k_p, 0)] \right\} \right. \\
&\quad + \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \left(\vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \left\{ \theta(k') \vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) + \theta(-k') \vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) \right\} \right) \\
&\quad - \frac{1}{N} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'', t)} \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \\
&\quad \left. \times \left\{ \theta(k') \mathbf{X}_{1,s}(k', k'') + \theta(-k') \mathbf{X}_{2,s}(k', k'') \right\} \vec{S}(k', k'', \epsilon_3) \right] \\
&= I_s^{(\Delta)}(k, k', t) + I_s^{(S)}(k, k', t) + I_s^{(\Upsilon)}(k, k', t),
\end{aligned} \tag{6.38}$$

$$\begin{aligned}
\vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) &= e^{ik'a} B_s(k') C_s(k_2, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad k_2 = k - i\frac{\epsilon_2}{a} \quad \text{und} \\
\vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) &= \begin{pmatrix} 0 \\ e^{ik'a} C_s(-k', t) \\ e^{-ik'a} A_{s,R}(k') C_s(k_2, t) \\ e^{ik'a} [C_s(k_2, t) - C_s(-k', t)] \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Zur Bestimmung des Stromes muß jetzt noch $\varrho_{s,R,1}$ berechnet und damit die k' -Integration ausgeführt werden.

6.6 Ausführen der k' -Integration

Nach (6.3) taucht neben dem Faktor $e^{-iW(k', t)}$ noch das Skalarprodukt ${}_s\langle k', \tau_0 | k, 0 \rangle_s$ auf.

Durch Ersetzen von k'' durch k' und Komplexkonjugation erhält man aus (6.6):

$$\begin{aligned}
{}_s\langle k', \tau_0 | k, 0 \rangle_s &= \frac{1}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ e^{-i(k-k')a(s-2)} \vec{S}^{*T}(k, k', \epsilon) \mathbf{M}_{3,s}^*(k') \vec{\theta}(k, k') \right\} \\
&= \frac{1}{N} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ e^{-i(k-k')a(s-2)} \vec{S}^T(k, k', \epsilon) [\mathbf{M}'_{3,s}(k')]^* \vec{\theta}(k, k') \right\}, \quad \text{wobei}
\end{aligned} \tag{6.39}$$

\mathbf{M}' durch Vertauschen der 1. mit der 4. Reihe und der 2. mit der 3. Reihe aus \mathbf{M} hervorgeht:

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} \vec{M}^T(4) \\ \vec{M}^T(3) \\ \vec{M}^T(2) \\ \vec{M}^T(1) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \vec{M}^T(1) \\ \vec{M}^T(2) \\ \vec{M}^T(3) \\ \vec{M}^T(4) \end{pmatrix}.$$

6.6.1 $k = 0$ ist lokalisierter Zustand

Setzt man (6.33) in (6.3) ein, so gilt:

$$\begin{aligned}
\varrho_{2,R,1}(0, t) &= \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k', t)} B_2(-|k'|) \\
&\quad \times \left[I_2^{(S)}(0, k', t) + I_2^{(\Delta)}(0, k', t) + I_2^{(\Upsilon)}(0, k', t) \right] \\
&= \varrho_{2,R,1}^{(S)}(0, t) + \varrho_{2,R,1}^{(\Delta)}(0, t) + \varrho_{2,R,1}^{(\Upsilon)}(0, t), \quad \text{wobei} \\
\varrho_{2,R,1}^{(S)}(0, t) &= \frac{1}{\tau_0^2 N} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' |B_2(k')|^2, \quad \text{also zeitunabhängig ist.}
\end{aligned} \tag{6.40}$$

Die anderen beiden Terme werden in Abschnitt 6.7 behandelt.

6.6.2 k ist ausgedehnter Zustand

Einsetzen von (6.38) in (6.3) liefert:

$$\begin{aligned}
\varrho_{s,R,1}(k, t) &= \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k', t)} {}_s \langle k', \tau_0 | k, 0 \rangle_s \\
&\quad \times \left[I_s^{(S)}(k, k', t) + I_s^{(\Delta)}(k, k', t) + I_s^{(\Upsilon)}(k, k', t) \right] \\
&= \varrho_{s,R,1}^{(S)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Delta)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t).
\end{aligned} \tag{6.41}$$

Auch hier wird zunächst nur $\varrho_{s,R,1}^{(S)}$ betrachtet.

Zieht man die Grenzübergänge vors Integral und setzt ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
\varrho_{s,R,1}^{(S)}(k, t) &= \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k', t)} e^{ik'a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) [\vec{M}'_{3,s}(k')]^* \vec{\theta}(k, k') \right\} \\
&\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \left[\theta(k') \vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) + \theta(-k') \vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \left(\int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^0 dk' e^{-iW(k', t)} e^{ik'a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) [\vec{M}'_{3,s,2}(k')]^* \right\} \right. \\
&\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) \right\} \\
&\quad \left. + \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k', t)} e^{ik'a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) [\vec{M}'_{3,s,1}(k')]^* \right\} \right. \\
&\quad \left. \times \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) \right\} \right) \\
&= \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} (I_1 + I_2).
\end{aligned} \tag{6.42}$$

Substitution in I_1 ergibt:

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(-k', t)} e^{-ik'a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) [\vec{M}'_{3,s,2}(-k')]^* \right\} \\
&\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \vec{U}_6(k, -k', t, \epsilon_2) \right\}.
\end{aligned}$$

I_1 und I_2 zusammengefaßt ist:

$$I_1 + I_2 = \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k', t)} \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) \mathbf{X}_{4,s}(k, k', t, \epsilon_2) \vec{S}(k, k', \epsilon_2) \quad \text{mit}$$

$$\begin{aligned}
X_{4,s,l}^{(j)}(k, k', t, \epsilon_2) &= e^{-ik'a(s-2)} [\tilde{M}'_{3,s,2}^{(j)}(-k')]^* \tilde{U}_6^{(l)}(k, -k', t, \epsilon_2) \\
&\quad + e^{ik'a(s-2)} [M'_{3,s,1}^{(j)}(k')]^* U_5^{(l)}(k, k', t, \epsilon_2), \quad \text{also}
\end{aligned} \tag{6.43}$$

$$\mathbf{X}_{4,s}(k, k', t, \epsilon_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -e^{ik'a(s-1)} B_s(k') C_s(k_2, t) \\ -e^{iW(k',t)} |B_s(k')|^2 & 0 & -e^{-ik'a(s-1)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik'a(s-1)} B_s(k') C_s(k_2, t) \\ e^{iW(k',t)} |B_s(k')|^2 & 0 & -e^{-ik'a(s-1)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)] & 0 \end{pmatrix},$$

d. h. $I_1 + I_2$ stellt ein Integral über sechs Summanden dar.

Möchte man die Integration für die 1. Spalte von $\mathbf{X}_{4,s}$ ausführen, so erkennt man, daß der Integrand und somit auch das Integral von der Zeit unabhängig ist:

$$\varrho_{s,R,1}^{(S)}(k, t) = H_1(k) + \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' e^{-iW(k',t)} \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) \hat{\mathbf{X}}_{4,s}(k, k', t, \epsilon_2) \vec{S}(k, k', \epsilon_2)$$

mit

$$H_1(k) = \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{\alpha}} dk' |B_s(k')|^2 \{S(-k - k', \epsilon_1) - S(k - k', \epsilon_1)\} S(k + k', \epsilon_2),$$

$\hat{\mathbf{X}}_{4,s}$ erhält man aus $\mathbf{X}_{4,s}$, indem man dort die 1. Spalte durch den Nullvektor ersetzt.

$$\hat{\mathbf{X}}_{4,s}(k, k', t, \epsilon_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -e^{ik'a(s-1)} B_s(k') C_s(k_2, t) \\ 0 & 0 & -e^{-ik'a(s-1)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik'a(s-1)} B_s(k') C_s(k_2, t) \\ 0 & 0 & -e^{-ik'a(s-1)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)] & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.45}$$

Die vier verbleibenden Summanden werden mit Hilfe des Residuensatzes berechnet.

Man schließt den Integrationsweg durch Υ_+ , weil $e^{-iW(k',t)}$ im Integrand steht.

- Nach den Aussagen von Anhang C.2 liefern nur die 2. Zeile und die 2. Spalte von $\hat{\mathbf{X}}_{4,s}$ einen Beitrag zum Residuum.

$$\begin{aligned}
S^{(2)}(k, k', \epsilon_1) \hat{X}_{4,s,3}^{(2)}(k, k', t, \epsilon_2) S^{(3)}(k, k', \epsilon_2) &= \\
&= -S(k - k', \epsilon_1) e^{-ik'a(s-1)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)] S(-k + k', \epsilon_2).
\end{aligned}$$

Damit erhält man nach analogem Vorgehen wie im vorherigen Abschnitt:

$$\begin{aligned}
g(e^{ik'a}) &= e^{ika} e^{-\epsilon_1} e^{-ik'a(s-1)} e^{-iW(k',t)} B_s(-k') [C_s(k_2, t) - C_s(k', t)], \\
z_1 &= e^{ika} e^{-\epsilon_1}, \\
z_2 &= e^{ika} e^{\epsilon_2}.
\end{aligned} \tag{6.46}$$

- Analog zu (6.29) liefert

$$\int_{\partial G_+} dk' B_2(-k') f(k')$$

den folgenden Beitrag zum Residuum:

$$F^{(\Delta)} = \Delta^+(k_p) N f(k_p) (1 - 2\tau_0^2) B_{\text{res}}(k_p). \tag{6.47}$$

Alles in allem ergibt sich dann:

$$\begin{aligned}
\varrho_{s,R,1}^{(S)}(k, t) &= H_1(k) \\
&+ \frac{1}{N} \left[\delta_{s2} \Delta^+(k_p) e^{-ik_p a} e^{-iW(k_p, t)} (1 - 2\tau_0^2) B_{\text{res}}(k_p) [C_s(k, t) - C_s(k_p, t)] \right. \\
&\quad \times \{S(-k - k_p, 0) - S(k - k_p, 0)\} S(-k + k_p, 0) \\
&\quad + \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{g(z_1)}{z_1 - z_2} \\
&\quad \left. - \frac{1}{N} \lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \int_{\Upsilon_+} dk' e^{-iW(k', t)} \vec{S}^T(k, k', \epsilon_1) \hat{X}_{4,s}(k, k', t, \epsilon_2) \vec{S}(k, k', \epsilon_2) \right] \\
&= H_1(k) + \varrho_{s,R,1}^{(S\Delta)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(SS)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(S\Upsilon)}(k, t).
\end{aligned} \tag{6.48}$$

Als Letztes muß noch $\varrho_{s,R,1}^{(SS)}(k, t)$ berechnet werden.

$$\begin{aligned}
\text{Mit} \quad k_1 &= k + i\frac{\epsilon_1}{a}, \quad k_2 = k - i\frac{\epsilon_2}{a} \\
\text{gilt:} \quad \frac{g(z_1)}{z_1 - z_2} &= e^{ik_1 a} e^{-ik_1 a(s-1)} e^{-iW(k_1, t)} B_s(-k_1) \frac{C_s(k_2, t) - C_s(k_1, t)}{e^{ik_1 a} - e^{ik_2 a}}.
\end{aligned}$$

Es ist egal, welcher Grenzübergang zuerst ausgeführt wird. Aus Gründen der Einfachheit wählen wir ϵ_1 .

$$\lim_{\epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{g(z_1)}{z_1 - z_2} = e^{ika} C_s^*(k, t) \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{C_s(k_2, t) - C_s(k, t)}{e^{ika} - e^{ik_2 a}}.$$

Bei der Bestimmung der Grenzwerte separat für Zähler und Nenner würde sich jeweils Null ergeben. Deshalb wendet man den Satz von de l'Hospital an [11]:

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{C_s(k_2, t) - C_s(k, t)}{e^{ika} - e^{ik_2 a}} &= \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial}{\partial \epsilon_2} [C_s(k_2, t) - C_s(k, t)]}{\frac{\partial}{\partial \epsilon_2} [e^{ika} - e^{ik_2 a}]} = - \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial}{\partial k_2} C_s(k_2, t)}{e^{ik_2 a}} \\
&= - \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \left[(s-1) + \frac{1}{a} \frac{\partial W(k_2, t)}{\partial k_2} + \frac{B'_s(k_2)}{ia B_s(k_2)} \right] \cdot \frac{C_s(k_2, t)}{e^{ik_2 a}}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Mit} \quad \frac{\partial W(k, t)}{\partial k} &= -\frac{2Vta}{\hbar} \sin ka \quad \text{ergibt sich:} \\
\varrho_{s,R,1}^{(SS)}(k, t) &= - \left[(s-1) + \frac{B'_s(k_2)}{ia B_s(k_2)} - \frac{2Vt}{\hbar} \sin ka \right] \frac{|C_s(k, t)|^2}{N} \\
&= \left[\frac{2Vt}{\hbar} \sin ka - (s-1) - \frac{B'_s(k_2)}{ia B_s(k_2)} \right] \frac{|B_s(k)|^2}{N} \\
&= \frac{2Vt}{N\hbar} \sin ka |B_s(k)|^2 + H_2(k).
\end{aligned} \tag{6.49}$$

Somit sind alle benötigten Größen berechnet, und es geht nun darum, die mit (Δ) und (Υ) bezeichneten Terme für große Zeiten abzuschätzen.

6.7 Abschätzungen

6.7.1 Exponentialfunktionen

Zunächst sollen $e^{iW(k_\beta, t)}$ und $e^{iW(k_p, t)}$ betrachtet werden. Verwendet man (6.20), so ergibt sich:

- Für den Realteil von k_β gilt:

$$\Re[k_\beta] = 0 \quad \text{oder} \quad \Re[k_\beta] = \frac{\pi}{a};$$

so wird $iW(k_\beta, t)$ rein imaginär und damit:

$$e^{iW(k_\beta, t)} = \exp \left\{ i \frac{2Vt\beta}{\hbar} \cosh(\Im[k_\beta a]) \right\}. \quad (6.50)$$

- Für $0 < k_r < \frac{\pi}{a}$ gilt für k_p mit negativem Imaginärteil:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iW(k_p, t)} = 0. \quad (6.51)$$

6.7.2 Mit (Δ) bezeichnete Terme

Weisen die zu betrachtenden Terme keine Divergenzen auf, so verschwinden sie nach (6.51) für große Zeiten. Dies gilt für die folgenden Terme:

$$\begin{aligned} & \varrho_{2,0,1}^{(\Delta)}(0, t), \quad I_2^{(\Delta)}(0, k_\beta, t), \quad \varrho_{2,0,1}^{(\Delta)}(k, t), \quad I_2^{(\Delta)}(k, k_\beta, t). \quad (6.52) \\ \bullet \quad & \varrho_{2,R,1}^{(\Delta)}(0, t) = \frac{\Delta^-(k_p)}{\tau_0^2 N} e^{iW(k_p, t)} B_{\text{res}}(k_p) \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k', t)} B_2(-|k'|) \vec{S}^T(k', k_p, 0) \\ & \quad \times \left\{ \theta(k') \vec{U}_1(k', k_p) + \theta(-k') \vec{U}_2(k', k_p) \right\} \end{aligned}$$

verschwindet auch für große Zeiten, denn das Integral, das $\varrho_{2,R,1}^{(\Delta)}(0, t)$ beinhaltet, kann aufgrund des reellen k' abgeschätzt werden.

- $\varrho_{2,R,1}^{(S\Delta)}$ muß, da C_s ebenfalls zeitabhängig ist, in zwei Anteile aufgespalten werden: Der Anteil, der $C_s(k, t)$ enthält, verschwindet für große Zeiten, der Anteil, der $C_s(k_p, t)$ beinhaltet, wird zeitunabhängig und deshalb gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \varrho_{2,R,1}^{(S\Delta)}(k, t) &= -\frac{\delta_{s2} \Delta^+(k_p)}{N} (1 - 2\tau_0^2) B_{\text{res}}(k_p) B_s(k_p) S(-k + k_p, 0) \\ & \quad \times \{S(-k - k_p, 0) - S(k - k_p, 0)\} \\ &= H_3(k). \quad (6.53) \end{aligned}$$

- Der Term $\varrho_{2,R,1}^{(\Delta)}(k, t)$ wirft die meisten Probleme auf. Er kann auf die folgende Struktur gebracht werden:

$$\begin{aligned} \varrho_{s,R,1}^{(\Delta)}(k, t) &= \frac{\delta_{s2} \Delta^-(k_p)}{N^2} e^{iW(k_p, t)} B_{\text{res}}(k_p) \{S(k + k_p, 0) - S(-k + k_p, 0)\} \\ & \quad \times \left(\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k', t)} \vec{S}^T(k_p, k', 0) \mathbf{X}_{5,2}(k_p, k') \vec{S}(k, k', \epsilon) \right). \end{aligned}$$

Es folgt der schon zuvor angewandte Formalismus, der zur nochmaligen Aufspaltung führt:

$$\varrho_{s,R,1}^{(\Delta)} = \varrho_{s,R,1}^{(\Delta S)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Delta\Delta)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Delta\Upsilon)}(k, t). \quad (6.54)$$

Für die einzelnen Terme gilt:

$$\begin{aligned}
\varrho_{s,R,1}^{(\Delta S)}(k, t) &\sim e^{iW(k_p, t)} e^{-iW(k, t)} \longrightarrow 0 \quad \text{für } t \rightarrow \infty \\
\varrho_{s,R,1}^{(\Delta \Delta)}(k, t) &\sim \Delta^-(k_p) e^{iW(k_p, t)} e^{-iW(k_p^*, t)} \longrightarrow 0 \quad \text{für } t \rightarrow \infty, \quad \text{also} \\
\lim_{t \rightarrow \infty} \varrho_{s,R,1}^{(\Delta)}(k, t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \varrho_{s,R,1}^{(\Delta \Upsilon)}(k, t) \quad \text{mit} \\
\varrho_{s,R,1}^{(\Delta \Upsilon)}(k, t) &= -\frac{\delta_{s2} \Delta^-(k_p)}{N^2} e^{iW(k_p, t)} B_{\text{res}}(k_p) \{S(k + k_p, 0) - S(-k + k_p, 0)\} \\
&\quad \times \left(\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Upsilon_+} dk' e^{-iW(k', t)} \vec{S}^T(k_p, k', 0) \mathbf{X}_{5,2}(k_p, k') \vec{S}(k, k', \epsilon) \right),
\end{aligned} \tag{6.55}$$

wobei $\mathbf{X}_{5,2}(k_p, k')$ in jedem von Null verschiedenen Element ein Faktor $B_2(k')$ bzw. $B_2(-k')$ auftaucht.

$\varrho_{s,R,1}^{(\Delta \Upsilon)}(k, t)$ wird im folgenden Abschnitt weiterbehandelt.

6.7.3 Mit (Υ) bezeichnete Terme

Diese Terme bestehen aus einem Integral über den Weg Υ_{\pm} und besitzen im Integrand $e^{\mp iW(k'', t)}$ als gemeinsamen Faktor.

Der Betrag des Integrals:

$$\left| \int_{\Upsilon_{\pm}} dk'' e^{\mp iW(k'', t)} f(k'') \right|$$

soll nach oben abgeschätzt werden.

Nach der Standardabschätzung für komplexe Kurvenintegrale gilt [10]:

$$\left| \int_{\Upsilon_{\pm}} dk'' e^{\mp iW(k'', t)} f(k'') \right| \leq \int_0^{\pi} du \left| e^{\mp iW(\Upsilon_{\pm}(u), t)} f(\Upsilon_{\pm}(u)) \Upsilon'_{\pm}(u) \right|, \tag{6.56}$$

wobei auf die rechte Seite der Ungleichung Sätze der reellen Analysis angewendet werden können. Damit gelangt man schließlich zur nachstehenden Abschätzung:

$$\left| \int_{\Upsilon_{\pm}} dk'' e^{\mp iW(k'', t)} f(k'') \right| \leq \frac{\pi}{2a} \cdot m \cdot \int_0^{\pi} du \left| e^{\mp iW(\Upsilon_{\pm}(u), t)} \right| = \frac{\pi}{2a} \cdot m \cdot I(t), \quad \text{wobei}$$

$$\max_{u \in [0, \pi]} |f(\Upsilon_{\pm}(u))| \leq m \quad \text{und} \tag{6.57}$$

$$|\Upsilon'_{\pm}(u)| = \left| \pm i \frac{\pi}{2a} e^{\pm iu} \right| = \frac{\pi}{2a} \quad \text{gilt.}$$

Die Abschätzung des Integrals $I(t)$ geschieht in Anhang C.4 und ergibt:

$$\begin{aligned}
I(t) &= \int_0^{\pi} du \left| e^{\mp iW(\Upsilon_{\pm}(u), t)} \right| \\
&= \int_0^{\pi} du \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar} \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] \right\} \\
&\leq 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} du \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar \pi} u^3 \right\} < \frac{2}{3} \Gamma \left(\frac{1}{3} \right) \left(\frac{\hbar \pi}{2Vt} \right)^{\frac{1}{3}},
\end{aligned} \tag{6.58}$$

wobei Γ die Gammafunktion ist.

Das Aussehen von m hängt von $f(k'')$ ab. Ausgeschlossen werden soll der Spezialfall, daß eine Polstelle von $B_s(k'')$ bzw. $B_s(-k'')$ auf Υ_- bzw. Υ_+ liegt. In diesem

Fall müßte der Integrationsweg geringfügig “verbogen” werden, was keinerlei Wirkung auf die anderen Abschätzungen hätte.

Gelingt die Abschätzung von f , so erhält man insgesamt:

$$\left| \int_{\Upsilon_{\pm}} dk'' e^{\mp iW(k'',t)} f(k'') \right| \leq \frac{\pi}{3a} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \cdot m \cdot \left(\frac{\hbar \pi}{2V}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot t^{-\frac{1}{3}} \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \rightarrow \infty. \quad (6.59)$$

Es ist nun für verschiedene $f(k'')$ das jeweilige m anzugeben:

- $f(k'') = |B_s(k'')|^2$.

Nach Ausschluß des obigen Spezialfalls existiert ein entsprechendes m :

Also verschwindet $\varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}(0, t)$ für große Zeiten.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}(0, t) = 0. \quad (6.60)$$

- $f(k'') = S(k_{\beta} + k'', 0)$. Man kann zeigen, daß:

$$|S(k_{\beta} + k'', 0)| \leq \frac{e^{\pi/2}}{e^{\Im[k_{\beta}a]} - 1}.$$

$$\text{Demnach gilt:} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} I_2^{(\Upsilon)}(0, k_{\beta}, t) = 0. \quad (6.61)$$

Analoges trifft auch für $f(k'') = S(\pm k_p \pm k'', 0)$ zu, insbesondere sind die Imaginärteile von k_{β} und k_p durch die Wahl von ϵ_0 und τ_0 eindeutig festgelegt.

Von allen weiteren abzuschätzenden Integrale ist dann der Grenzwert für $\epsilon_j \rightarrow 0$ zu ermitteln. Da sich nur dann $S(\pm k \pm \Upsilon_{\pm}(u), \epsilon)$ als divergierender Term erweist, wenn $k, \frac{u}{a} = 0, \frac{\pi}{a}$ und $\epsilon \rightarrow 0$ und da k erst im späteren Verlauf diese Werte annimmt oder gegen sie konvergiert, wird Integration und Grenzwertbildung vertauscht.

Steht im Integrand noch zusätzlich einer der Faktoren $B_s(\Upsilon_{\pm}(u))$ bzw. $B_s(-\Upsilon_{\pm}(u))$, so gelingt eine k -unabhängige Abschätzung, ist kein solcher Faktor vorhanden, so liefert die Abschätzung einen k -abhängigen Term.

$$f(k'') = |B_s(k'') \cdot S(k + k'', 0)|$$

Hierbei soll nur der Zähler von B_s und der Nenner von S auf dem Weg Υ_{\pm} betrachtet werden.

$$|f(k'')| < m_{0,\pm} \cdot \frac{|e^{ik''a} - e^{-ik''a}|}{|e^{\pm ika} - e^{\mp ik''a}|} = 2m_{0,\pm} \cdot \frac{|\sin k''a|}{|e^{\pm ika} - e^{\mp ik''a}|} = 2m_{0,\pm} \cdot Q(k''). \quad (6.62)$$

Genauere Untersuchungen von Q sind im Anhang C.4 dargestellt. Man erhält:

$$Q(\Upsilon_{\pm}(u)) < \sqrt{7}. \quad (6.63)$$

Auf diese Art und Weise können die folgenden Terme abgeschätzt werden:

$$\varrho_{2,0,1}^{(\Upsilon)}(k, t), \quad I_2^{(\Upsilon)}(k, k_{\beta}, t) \quad \text{und} \quad \varrho_{s,R,1}^{(\Delta\Upsilon)}(k, t) \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \rightarrow \infty. \quad (6.64)$$

In $\varrho_{2,R,1}^{(\Upsilon)}(0, t)$ treten zwei Integrale auf: Das äußere Integral besitzt einen Integrationsweg entlang der reellen Achse, beim inneren Integral wird über den Weg Υ_- integriert.

Den Betrag des inneren Integrals kann man, da der Integrand die oben angegebenen Terme enthält, auf diese Art abschätzen. Nach Vorziehen aller k' -unabhängigen Terme ist der verbleibende Integrand beschränkt, und es gilt:

$$\varrho_{2,R,1}^{(\Upsilon)}(0, t) \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \rightarrow \infty. \quad (6.65)$$

$$f(k'') = |S(k + k'', 0)|$$

Steht kein B_s mit passendem Argument zur Verfügung, so wird $|f(k'')|$ mit Hilfe von k abgeschätzt. Man erhält (ausführlich in Anhang C.4):

$$|e^{\pm ika} - e^{\mp ik''a}| > \sqrt{\frac{2}{\pi}} P(k), \quad P(k) = \begin{cases} ka & 0 < ka < \frac{\pi}{2} \\ \pi - ka & \frac{\pi}{2} < ka < \pi \end{cases}. \quad (6.66)$$

Betrachtet man nun $\varrho_{s,R,1}^{(S\Upsilon)}(k, t)$, so ist wegen der Zeitabhängigkeit von $\hat{\mathbf{X}}_{4,s}$ eine Aufspaltung notwendig:

$\varrho_{s,R,1}^{(S\Upsilon)}(k, t)$ besteht aus einem zeitunabhängigen Anteil:

$$H_4(k) = \frac{1}{N^2} \int_{\Upsilon_+} dk' |B_s(k')|^2 S(-k + k', 0) \{S(-k - k', 0) - S(k - k', 0)\}$$

und einem Anteil, der proportional zu

$$e^{iW(k,t)} \sin ka \int_{\Upsilon_+} dk' e^{-iW(k',t)} \sin k'a \vec{S}^T(k, k', 0) \mathbf{X}_{6,s}(k') \vec{S}(k, k', 0) \quad \text{ist.}$$

Nach dem oben Gesagten gilt:

$$\varrho_{s,R,1}^{(S\Upsilon)}(k, t) \longrightarrow H_4(k) \quad \text{für} \quad t \rightarrow \infty. \quad (6.67)$$

$$\varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t)$$

Aus (6.41) und (6.39) ergibt sich $\varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t)$ wie folgt:

$$\begin{aligned} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t) &= \frac{1}{N^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k',t)} B_s(k') e^{ik'a(s-2)} \{S(k + k', \epsilon) - S(-k + k', \epsilon)\} \\ &\quad \times \int_{\Upsilon_-} dk'' e^{iW(k'',t)} \vec{S}^T(k, k'', 0) \mathbf{X}_{3,s}(k'') \vec{S}(k', k'', 0). \end{aligned} \quad (6.68)$$

Man kann nun $\varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t)$ wie oben beschrieben abschätzen, die Integration über k liefert dann an den Rändern Divergenzen.

Deshalb differenziert man $\varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t)$ nach der Zeit und erhält mit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (e^{iW(k,t)}) &= i \frac{E(k)}{\hbar} e^{iW(k,t)} \quad \text{und} \\ S(k \pm k', \epsilon) - S(-k \pm k', \epsilon) &= \frac{i \sin ka}{\cos(k'a \pm i\epsilon) - \cos ka} \quad \text{das Folgende:} \\ \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t) &= \frac{2iV}{N^3 \hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k',t)} B_s(k') e^{ik'a(s-2)} \end{aligned} \quad (6.69)$$

$$\begin{aligned}
 & \times \frac{i \sin ka}{\cos(k'a + i\epsilon) - \cos ka} \\
 & \times \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} \frac{i \sin ka [\cos k''a - \cos k'a]}{\cos k''a - \cos ka} \\
 & \quad \times \left[B_s(k'') e^{ik''a(s-2)} S(k' + k'', 0) \right. \\
 & \quad \left. + B_s(-k'') e^{-ik''a(s-2)} S(k' - k'', 0) \right].
 \end{aligned}$$

Durch Hinzufügen von $+\cos ka - \cos ka$ zur inneren Ableitung ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t) &= \frac{2V \sin ka}{N^3 \hbar} \left\{ \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k',t)} B_s(k') e^{ik'a(s-2)} \right. \\
 & \quad \times \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} \vec{S}^T(k, k'', 0) \mathbf{X}_{3,s}(k'') \vec{S}(k', k'', 0) \\
 & \quad - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk' e^{-iW(k',t)} B_s(k') e^{ik'a(s-2)} \\
 & \quad \times \{S(k + k', \epsilon) - S(-k + k', \epsilon)\} \\
 & \quad \times \int_{\Gamma_-} dk'' e^{iW(k'',t)} \left[B_s(k'') e^{ik''a(s-2)} S(k' + k'', 0) \right. \\
 & \quad \left. + B_s(-k'') e^{-ik''a(s-2)} S(k' - k'', 0) \right] \left. \right\}.
 \end{aligned}$$

Auch hier schränkt man die k' -Integration auf das Intervall $[0, \frac{\pi}{a}]$ ein, wendet den Residuensatz an und zerlegt $\frac{\partial}{\partial t} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t)$ in drei Anteile.

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t) = \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon S)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon \Delta)}(k, t) + \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon \Upsilon)}(k, t).$$

Alle drei Summanden können mit den oben beschriebenen Verfahren abgeschätzt werden, und es gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \varrho_{s,R,1}^{(\Upsilon)}(k, t) = 0. \quad (6.70)$$

Somit sind alle abschätzbaren Terme behandelt worden, und wir können uns jetzt den Besetzungswahrscheinlichkeiten und Strömen zuwenden.

6.8 Besetzungswahrscheinlichkeiten und Ströme pro Zustand

Die unten angegebenen Formeln für die Besetzungswahrscheinlichkeiten und Ströme gelten für große Zeiten, also dann, wenn die im letzten Abschnitt angesprochenen Terme verschwunden sind.

- Für konvergierende Funktionen nennt man:

$$f(\infty) := \lim_{t \rightarrow \infty} f(t),$$

- für nichtkonvergierende Funktionen bedeutet:

$$f(t) \rightarrow f_a(t),$$

daß für t gegen unendlich f_a die Asymptote von f ist,

und mit den Abschätzungen des letzten Abschnitts ergibt sich dann:

6.8.1 Besetzungswahrscheinlichkeit der Stelle $j = 0$

Nach (6.5) gilt:

- für $k = 0$ nach (6.31):

$$\begin{aligned} \varrho_{2,0,1}(0, \infty) &= 0, \\ \varrho_{2,0,2}(0, t) &= \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta)}{\tau_0^2 N_{g,2,\beta}} e^{-iW(k_\beta, t)}, \quad \text{also} \\ \rho_2(0, 0, \infty) &= \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta)}{\tau_0^4 N_{g,2,\beta}^2}, \end{aligned} \quad (6.71)$$

- für propagierende k nach (6.34):

$$\begin{aligned} \varrho_{2,0,1}(k, t) &\rightarrow \frac{1}{\tau_0 \sqrt{N}} e^{iW(k, t)} B_2(-k) [2B_2(k) - 1], \\ \varrho_{2,0,2}(k, t) &= \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta)}{\tau_0 N_{g,2,\beta} \sqrt{N}} e^{-iW(k_\beta, t)} [S(k + k_\beta, 0) - S(-k + k_\beta, 0)]^* \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_2(0, k, t) &\rightarrow \frac{1}{\tau_0^2 N} \left\{ \left[|B_2(k)|^2 + \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) \sin^2 ka}{N_{g,2,\beta}^2 |\cos k_\beta a - \cos ka|^2} \right] \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) \sin ka}{N_{g,2,\beta} (\cos k_\beta a - \cos ka)} 2\Re \left[i B_2(k) e^{-i[W(k_\beta, t) - W(k, t)]} \right] \right\} \\ &=: \rho_2^{(C)}(0, k) + \rho_2^{(O)}(0, k, t), \quad k > 0. \end{aligned} \quad (6.72)$$

Damit besteht $\rho_2(0, k, t)$ für große Zeiten aus einem konstanten Anteil $\rho_2^{(C)}(0, k)$ und einem zeitlich oszillierenden Anteil $\rho_2^{(O)}(0, k, t)$.

6.8.2 Besetzungswahrscheinlichkeiten für das rechte Reservoir

Mit Hilfe von (6.3) kann man zeigen, daß:

- für den gebundenen Zustand $k = 0$ nach (6.40)

$$\begin{aligned} \varrho_{2,R,1}(0, \infty) &= \frac{1}{\tau_0^2 N} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk' |B_2(k')|^2 \\ \varrho_{2,R,2}(0, \infty) &= 0 \end{aligned} \quad (6.73)$$

- und für ausgedehnte Zustände $k > 0$ nach (6.41)

$$\begin{aligned} \varrho_{s,R,1}(k, t) &\rightarrow \frac{1}{N} |B_s(k)|^2 \left(\frac{2V \sin ka}{\hbar} \right) t + \varrho_{s,R,1}^{(Y)}(k, t) + \sum_{j=1}^4 H_j(k) \\ \varrho_{s,R,2}(k, t) &\rightarrow -\delta_{s2} \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) \sin ka}{N N_{g,2,\beta} (\cos k_\beta a - \cos ka)} \\ &\quad 2\Re \left[\frac{i e^{ika}}{e^{ika} - e^{-ik_\beta a}} B_2(k) e^{-i[W(k_\beta, t) - W(k, t)]} \right]. \end{aligned} \quad (6.74)$$

Also besteht $\varrho_{s,R,1}(k, t)$ für große Zeiten aus einem konstanten, einem in t linearen Anteil und aus $\varrho_{s,R,1}^{(Y)}(k, t)$, hingegen $\varrho_{s,R,2}(k, t)$ aus einem oszillierenden Term.

6.8.3 Ströme pro Zustand

Die Ströme pro Zustand berechnet man dadurch, daß man die Besetzungswahrscheinlichkeiten nach der Zeit differenziert.

Außer in $\varrho_{s,R,1}(k, t)$ kommt die Variable t nur im Argument der Exponentialfunktion vor, so daß (6.69) angewandt werden kann.

Betrachtet man die Terme in den Besetzungswahrscheinlichkeiten, die für große Zeiten verschwinden, so ändert eine zuvor vorgenommene zeitliche Ableitung nichts an dieser Eigenschaft.

Deshalb ändern sich die Besetzungen des Platzes $l = 0$ für den gebundenen Zustand $k = 0$ nicht:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, 0, t) = \lim_{t \rightarrow \infty} [j_2(r_0 = 0, 0, t) - j_2(r_1 = a, 0, t)] = 0 \quad \text{und} \quad (6.75)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} j_2(a, 0, t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} [\varrho_{2,R,1}(0, t) + \varrho_{2,R,2}(0, t)] = 0. \quad (6.76)$$

Für Blochzustände oszilliert die Änderung der Besetzung der Stelle $l = 0$ mit der Zeit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, k, t) &= j_2(0, k, t) - j_2(a, k, t), \quad k > 0 \\ &\rightarrow - \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) 2V \sin ka}{\tau_0^2 N \cdot N_{g,2,\beta} \cdot \hbar} 2\Re \left[B_2(k) e^{-i[W(k_{\beta},t) - W(k,t)]} \right]. \end{aligned} \quad (6.77)$$

Der Strom pro Zustand, der ins rechte Reservoir fließt, setzt sich aus je einem zeitlich konstanten und oszillierenden Anteil zusammen:

$$\begin{aligned} j_s(a, k, t) &= \frac{\partial}{\partial t} [\varrho_{s,R,1}(k, t) + \varrho_{s,R,2}(k, t)] \\ &\rightarrow \frac{2V \sin ka}{N \cdot \hbar} \cdot \left\{ |B_s(k)|^2 \right. \\ &\quad \left. - \delta_{s2} \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta)}{N_{g,2,\beta}} 2\Re \left[\frac{e^{ika}}{e^{ika} - e^{-ik_{\beta}a}} B_2(k) e^{-i[W(k_{\beta},t) - W(k,t)]} \right] \right\} \\ &= j_s^{(C)}(a, k) + j_s^{(O)}(a, k, t), \quad k > 0. \end{aligned} \quad (6.78)$$

Der zeitlich konstante Anteil ist proportional zu

$$\begin{aligned} T_s(k) = |B_s(k)|^2 \quad \text{und} \quad v(k) &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} = -\frac{2Va}{\hbar} \sin ka, \quad \text{also} \\ j_s^{(C)}(a, k) &\sim T_s(k) \cdot v(k). \end{aligned} \quad (6.79)$$

Das bedeutet, daß für große Zeiten dieser Anteil die 2-Punkt-Landauer-Formel reproduzieren kann [12, 13]. Doch dazu mehr im nächsten Kapitel.

6.8.4 Betrachtungen für $k < 0$

Bisher wurden die Besetzungswahrscheinlichkeiten und Ströme pro Zustand nur für $k > 0$ berechnet. Durch Symmetriebetrachtungen erhält man die entsprechenden Größen für negative k -Werte:

Im Modell ohne ausgezeichnete Stelle ergibt sich wegen der Symmetrie der Anordnung bzgl. $x = \frac{a}{2}$:

$$j_1(a, -k, t) = -j_1(a, k, t). \quad (6.80)$$

Das Modell mit ausgezeichneter Stelle ist symmetrisch bzgl. dieses ausgezeichneten Platzes. Deshalb gilt hier:

$$j_2(a, -k, t) = -j_2(0, k, t) = -j_2(a, k, t) - \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, k, t), \quad (6.81)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, -k, t) - j_2(a, -k, t) = -j_2(0, -k, t) = j_2(a, k, t). \quad (6.82)$$

Addiert man (6.81) und (6.82), so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, -k, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \rho_2(0, k, t) && \text{und weil} \\ \rho_2(0, -k, t=0) &= \rho_2(0, k, t=0) && \text{gilt also auch} \\ \rho_2(0, -k, t) &= \rho_2(0, k, t), && \end{aligned} \quad (6.83)$$

was man auch aus der Symmetrie direkt ableiten hätte können.

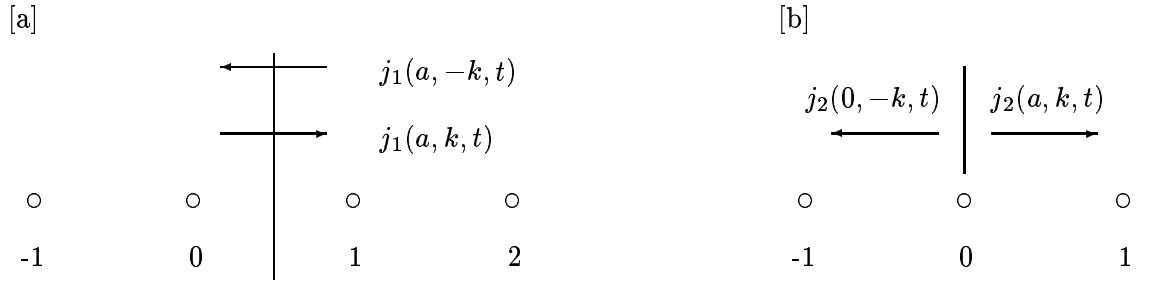


Abbildung 6.1: Ströme über die Kontakte in Modell 1 (= [a]) und in Modell 2 (= [b])

Aus diesem Grund erhält man:

$$\left. \begin{aligned} \rho_2(0, k, t) &\rightarrow \rho_2^{(C)}(0, k) + \rho_2^{(O)}(0, |k|, t) \\ j_s(a, k, t) &\rightarrow j_s^{(C)}(a, k) + j_s^{(O)}(a, k, t) \end{aligned} \right\} \quad 0 < |k| < \frac{\pi}{a} \quad \text{mit:}$$

$$j_s^{(O)}(a, k, t) = \delta_{s2} \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda \beta) 2V \sin ka}{N \cdot N_{g,2,\beta} \cdot \hbar} \quad (6.84)$$

$$\times 2\Re \left[\left(\frac{-\text{sgn}(k)e^{ika}}{e^{ika} - e^{-ik_{\beta}a}} + \theta(-k) \right) B_2(k) e^{-i[W(k_{\beta}, t) - W(k, t)]} \right].$$

Somit sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten und Ströme pro Zustand berechnet, und wir können uns dem Gesamtstrom und der Besetzung des Platzes $j = 0$ zuwenden, was im nächsten Kapitel geschehen wird.

Kapitel 7

Diskussion verschiedener Fälle

Bevor nun die Betrachtung für unterschiedliche τ_0 - ϵ_0 -Kombinationen angestellt werden kann, sollte der Gesamtstrom bzw. die Gesamtbesetzung berechnet werden.

Dazu muß man festlegen, welche Zustände zur Anfangszeit t_0 besetzt sind. Man erreicht dies durch die Einführung des elektrochemischen Potentials.

Die Modellpreparation ($\epsilon_l = 0$ für $l \neq 0$) impliziert, daß die beiden Reservoirs auf dem gleichen elektrischen Potential $\phi = 0$ liegen, also das elektrochemische Potential durch das chemische Potential bestimmt ist [3].

Das linke Reservoir besitze demnach zur Zeit t_0 das elektrochemische Potential μ_L , das rechte Reservoir habe das Potential μ_R .

- Falls $\mu_L = \mu_R$ gilt, erwartet man, daß für große Zeiten kein Strom fließt.
- Für $\mu_L \neq \mu_R$ erwartet man einen Stromfluß.

In den Modellen wurden deshalb unendlich lange Ketten gewählt, damit ein Ausgleich der Reservoirs nicht möglich ist. Dann sind die chemischen Potentiale zeitunabhängig. So erwartet man für große Zeiten einen konstanten Strom, der für kleine Differenzen der Potentiale den Strom der Zwei-Punkt-Landauer-Formel darstellt.

7.1 Gesamtstrom und -besetzung

Von den Größen pro Zustand gelangt man zu den Größen, indem man für die Temperatur $T = 0$ über die besetzten Zustände integriert.

Für Temperaturen $T \neq 0$ sind die Zustände gemäß der Fermi-Verteilungsfunktion besetzt, also taucht die Fermifunktion f als Gewichtungsfaktor unter dem Integral auf; der gebundene Zustand $k = 0$ wird hinzuaddiert oder weggelassen, je nachdem ob zur Zeit t_0 dieser Zustand besetzt ist oder nicht:

$$\begin{aligned} n_2(0, t, T) &= \Delta^{(0)} \cdot \rho_2(0, 0, t) + \int_{-\frac{\pi}{a}}^0 dk f(E(k) - \mu_R, T) \rho_2(0, k, t) \\ &\quad + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk f(E(k) - \mu_L, T) \rho_2(0, k, t) \quad \text{und analog:} \\ I_s(a, t, T) &= \Delta^{(0)} \cdot \delta_{s2} \cdot j_2(a, 0, t) + \int_{-\frac{\pi}{a}}^0 dk f(E(k) - \mu_R, T) j_s(a, k, t) \\ &\quad + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk f(E(k) - \mu_L, T) j_s(a, k, t) \quad \text{mit} \end{aligned} \quad (7.1)$$

$$f(E, T) = \left[\exp \left\{ \frac{E}{k_B T} \right\} + 1 \right]^{-1}, \quad k_B = \text{Boltzmannkonstante und}$$

$$\Delta^{(0)} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}, \text{ falls Zustand } k = 0 \text{ zur Zeit } t_0 \begin{cases} \text{besetzt} \\ \text{unbesetzt} \end{cases}.$$

Jetzt sollen erst die zeitabhängigen Anteile behandelt werden.

7.1.1 Oszillierende Anteile

Die Zeitabhängigkeit steckt in den oszillierenden Anteilen im Argument einer Exponentialfunktion:

$$i[W(k_\beta, t) - W(k, t)] = i \frac{2V}{\hbar} \left[\beta \cosh(\Im[k_\beta a]) - \cos ka \right] \cdot t. \quad (7.2)$$

Betrachtet man nun die k -abhängigen Teile und substituiert k durch E so erhält man:

$$\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk f(E(k) - \mu, T) j_s^{(O)}(a, k, t) \sim \Re \left[\int_{-2V}^{2V} dE f(E - \mu, T) g(E) \exp \left\{ -i \frac{Et}{\hbar} \right\} \right] \quad (7.3)$$

mit stetigem g . Daraus folgt, daß:

- für $T \neq 0$ $f \cdot g$ stetig ist,
- für $T = 0$ aus der Fermifunktion eine Stufenfunktion:

$$f(E) \longrightarrow \theta(-E) \quad (7.4)$$

und damit der Integrationsbereich eingeschränkt wird.

Im weiteren kann man durch partielle Integration zeigen, daß für ein g mit beschränkter Ableitung

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{x_0}^{x_1} dx g(x) e^{ixt} = 0 \quad \text{ist,} \quad (7.5)$$

und sich somit Integrale der Form (7.3) für $t \rightarrow \infty$ wegoszillieren.

Damit brauchen wir uns nur noch um die zeitlich konstanten Terme zu kümmern.

7.1.2 Zeitlich konstante Anteile

Somit gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} n_2(0, t, T) &= n_2(0, \infty, T) \\ &= \Delta^{(0)} \cdot \rho_2(0, 0, \infty) \\ &\quad + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \left[f(E(k) - \mu_L, T) + f(E(k) - \mu_R, T) \right] \rho_2^{(C)}(0, k), \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} I_s(a, t, T) &= I_s(a, \infty, T) \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \left[f(E(k) - \mu_L, T) - f(E(k) - \mu_R, T) \right] j_s^{(C)}(a, k). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Durch Substitution von k durch E erhält man:

$$I_s(a, \infty, T) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-2V}^{2V} dE \left[f(E - \mu_L, T) - f(E - \mu_R, T) \right] \tilde{T}_s(E, \tau_0). \quad (7.8)$$

So hat sich die Erwartung bestätigt, denn für $\mu_L = \mu_R$ gilt:

$$I_s(a, \infty, T)_{\mu_L = \mu_R} = 0. \quad (7.9)$$

7.1.3 Temperatur $T = 0$

Ist die Temperatur $T = 0$, so ergibt sich aus (7.4), (7.6) und (7.8):

$$\begin{aligned}
 n_2(0, \infty, T = 0) &= \Delta^{(0)} \cdot \rho_2(0, 0, \infty) + \left(\int_{k_L}^{\frac{\pi}{a}} + \int_{k_R}^{\frac{\pi}{a}} \right) dk \rho_2^{(C)}(0, k) \\
 &=: \Delta^{(0)} \cdot \rho_2(0, 0, \infty) + \sum_{i=L,R} n(\mu_i) \\
 I_s(a, \infty, T = 0) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE \tilde{T}_s(E, \tau_0) \quad \text{mit} \\
 k_i &= \frac{1}{a} \arccos \frac{\mu_i}{2V}, \quad \text{wobei}
 \end{aligned} \tag{7.10}$$

\tilde{T}_s der Transmissionskoeffizient nach (3.20) und (3.37) ist.

Also können $n_2(0, \infty, 0)$ und $I_s(a, \infty, 0)$ analytisch berechnet werden.

7.1.4 Bezug zur Landauerformel

Aus Gleichung (7.10) kann man die Zwei-Punkt-Landauer-Formel erhalten, wenn die Differenz zwischen den chemischen Potentialen (Fermi-Energien) so klein ist, daß die Energieabhängigkeit von $\tilde{T}_s(E, \tau_0)$ in diesem Bereich vernachlässigt werden kann. Dann gilt:

$$\int_{\mu_R}^{\mu_L} dE \tilde{T}_s(E, \tau_0) \approx \tilde{T}_s(E, \tau_0) \cdot (\mu_L - \mu_R). \tag{7.11}$$

Unter Beachtung des Spins und mit

$$\tilde{T}_s(E, \tau_0) = \tilde{T}_s(\mu_L, \tau_0) = \tilde{T}_s(\mu_R, \tau_0) = \tilde{T}_s(\mu, \tau_0)$$

berechnet sich der Ladungsstrom zu:

$$I_s^{(q)}(a, \infty, 0) = 2e I_s(a, \infty, 0) = \frac{e}{\pi\hbar} \tilde{T}_s(\mu, \tau_0) \cdot (\mu_L - \mu_R), \tag{7.12}$$

was die gesuchte Zwei-Punkt-Landauer-Formel darstellt [12, 13, 14].

Die in Formel (7.10) vorkommenden Integrale könnten explizit berechnet werden. Die Aussagekraft des Ergebnisses wäre nicht sehr groß, da viele Variablen in der Endformel auftauchen würden. Dies kann man am einfachsten an der Berechnung von $I_1(a, \infty, 0)$ verdeutlichen, was nachfolgend auch geschehen soll.

Es sei noch erwähnt, daß in den folgenden Abschnitten Berechnungen für die Temperatur $T = 0$ vorgenommen werden.

7.2 Stromberechnung im Modell 1

Zunächst wird $I_1(a, \infty, 0)$ für $0 < \tau_0^2 < 1$ berechnet und dann das Ergebnis für $\tau_0^2 \ll 1$ vereinfacht. Zum Vergleich wird dann $\tilde{T}_1(E, \tau_0)$ für $\tau_0^2 \ll 1$ berechnet und danach integriert. Nach (3.20) gilt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{T}_1(E, \tau_0) &= \frac{\tau_0^2 (4V^2 - E^2)}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - \tau_0^2 E^2} \\
 &= 1 - \frac{(1 - \tau_0^2)^2 V}{2(1 + \tau_0^2)} \left[\frac{1}{(1 + \tau_0^2)V + \tau_0 E} + \frac{1}{(1 + \tau_0^2)V - \tau_0 E} \right].
 \end{aligned} \tag{7.13}$$

In den Nennern treten keine Nullstellen auf, und man erhält:

$$\int_{\mu_R}^{\mu_L} dE \tilde{T}_1(E, \tau_0) = \mu_L - \mu_R - \frac{(1 - \tau_0^2)^2 V}{2(1 + \tau_0^2) \tau_0} \ln \left. \frac{(1 + \tau_0^2) V + \tau_0 E}{(1 + \tau_0^2) V - \tau_0 E} \right|_{\mu_R}^{\mu_L} \quad \text{und damit:}$$

$$I_1(a, \infty, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \mu_L - \mu_R - \frac{(1 - \tau_0^2)^2 V}{2(1 + \tau_0^2) \tau_0} \right. \\ \left. \times \ln \left[\frac{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 + (1 + \tau_0^2) \tau_0 V (\mu_L - \mu_R) - \tau_0^2 \mu_L \mu_R}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - (1 + \tau_0^2) \tau_0 V (\mu_L - \mu_R) - \tau_0^2 \mu_L \mu_R} \right] \right\}. \quad (7.14)$$

Der den Logarithmus enthaltende Term gestaltet sich zu:

$$\frac{(1 - \tau_0^2)^2 V}{2(1 + \tau_0^2) \tau_0} \left[\ln \left(1 + \frac{(1 + \tau_0^2) \tau_0 V (\mu_L - \mu_R)}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - \tau_0^2 \mu_L \mu_R} \right) - \ln \left(1 - \frac{(1 + \tau_0^2) \tau_0 V (\mu_L - \mu_R)}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - \tau_0^2 \mu_L \mu_R} \right) \right].$$

Durch Abschätzen der Logarithmen erhält man:

$$I_1(a, \infty, 0) \approx \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ (\mu_L - \mu_R) - \frac{(1 - \tau_0^2)^2 V^2}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - \tau_0^2 \mu_L \mu_R} (\mu_L - \mu_R) \right\} \\ = \frac{\tau_0^2}{2\pi\hbar} \cdot \frac{4V^2 - \mu_L \mu_R}{(1 + \tau_0^2)^2 V^2 - \tau_0^2 \mu_L \mu_R} (\mu_L - \mu_R),$$

und durch Vernachlässigen der τ_0 -abhängigen Terme im Nenner ergibt sich schließlich:

$$I_1(a, \infty, 0) \approx \frac{\tau_0^2}{2\pi\hbar} \left(4 - \frac{\mu_L \mu_R}{V^2} \right) (\mu_L - \mu_R). \quad (7.15)$$

Schätzt man zuerst $\tilde{T}_1(E, \tau_0)$ für sehr kleine τ_0^2 ab, so gilt:

$$\tilde{T}_1(E, \tau_0 \ll 1) = \tau_0^2 \left(4 - \frac{E^2}{V^2} \right).$$

Die Integration liefert:

$$\int_{\mu_R}^{\mu_L} dE \tilde{T}_1(E, \tau_0 \ll 1) = \tau_0^2 \left(4 - \frac{\mu_L^2 + \mu_L \mu_R + \mu_R^2}{3V^2} \right) \cdot (\mu_L - \mu_R),$$

was für $\mu_L \approx \mu_R$ in (7.15) übergeht.

Das heißt, der Wahrscheinlichkeitsstrom über die Kontaktstelle ist für die Temperatur $T = 0$ und zu großen Zeiten

- proportional zu τ_0^2
- proportional zur Differenz der chemischen Potentiale
- abhängig von der Lage der chemischen Potentiale.

Man betrachte dazu auch Abbildung 7.1 auf Seite 72.

Damit wären die Betrachtungen zum Modell ohne ausgezeichnete Stelle abgeschlossen, und wir können uns jetzt noch dem Modell mit ausgezeichneter Stelle zuwenden.

Da dort gebundene Zustände möglich sind, ist die Unterscheidung von zwei Fällen notwendig.

7.3 Gebundene Zustände im Modell 2

Lokalisierte Zustände treten auf, wenn

$$|\lambda| > 1 - \tau_0^2 \approx 1 \quad \text{gilt.}$$

7.3.1 Wahrscheinlichkeitsstrom

Mit $2\lambda V = \epsilon_0$ kann

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2(E, \tau_0) &= \frac{\tau_0^4 (4V^2 - E^2)}{[2\lambda V - (1 - \tau_0^2) E]^2 + \tau_0^4 (4V^2 - E^2)} \quad \text{durch} \quad (7.16) \\ \tilde{T}_{(lok)}(E) &= \tau_0^4 \frac{4V^2 - E^2}{(\epsilon_0 - E)^2} \approx \tilde{T}_2(E, \tau_0 \ll 1) \quad \text{ersetzt werden.} \end{aligned}$$

Umformungen führen zu:

$$\tilde{T}_{(lok)}(E) = \tau_0^4 \left\{ -1 - \epsilon_0 \cdot \frac{(-2)(\epsilon_0 - E)}{(\epsilon_0 - E)^2} + \frac{4V^2 - \epsilon_0^2}{(\epsilon_0 - E)^2} \right\},$$

was leicht integriert werden kann, und man erhält:

$$I_2(a, \infty, 0) = \frac{\tau_0^4}{2\pi\hbar} \left\{ \left(-\frac{\epsilon_0^2 - 4V^2}{(\epsilon_0 - \mu_L)(\epsilon_0 - \mu_R)} - 1 \right) (\mu_L - \mu_R) - \epsilon_0 \ln \left(\frac{\epsilon_0 - \mu_L}{\epsilon_0 - \mu_R} \right)^2 \right\}. \quad (7.17)$$

In diesem Fall ist der Wahrscheinlichkeitsstrom:

- proportional zu τ_0^4 ,
- abhängig von der Differenz der Potentiale,
- abhängig von der Differenz zwischen dem Potential μ_i und der lokalen Energie ϵ_0 .

Liegt die lokale Energie weit ober- oder unterhalb des Energiebands, so kann \tilde{T}_2 durch:

$$\tilde{T}_2(E, \tau_0) \approx \tau_0^4 \cdot \frac{4V^2 - E^2}{\epsilon_0^2}$$

abgeschätzt werden, und es gilt analog zu (7.15), daß für $\mu_L \approx \mu_R$:

$$I_2(a, \infty, 0) \approx \frac{\tau_0^4}{2\pi\hbar} \cdot \frac{4V^2 - \mu_L \mu_R}{\epsilon_0^2} \cdot (\mu_L - \mu_R) \quad \text{wird.} \quad (7.18)$$

Hierzu betrachte man ebenfalls Abbildung 7.1.

7.3.2 Besetzungswahrscheinlichkeit

Betrachtet man die Besetzungen, so läßt sich der Term $\rho_2^{(C)}(0, k)$ in zwei Teile aufspalten. Schätzt man den Teil des Integrals, das $T_2(k, \tau_0)$ enthält, auf die gleiche Art und Weise ab, so erhält man den folgenden Ausdruck (ohne τ_0 -Abhängigkeit):

$$Q \left(k_i, \frac{\pi}{a}, \lambda \right) = \int_{k_i}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{\sin^2 ka}{(\lambda - \cos ka)^2}. \quad (7.19)$$

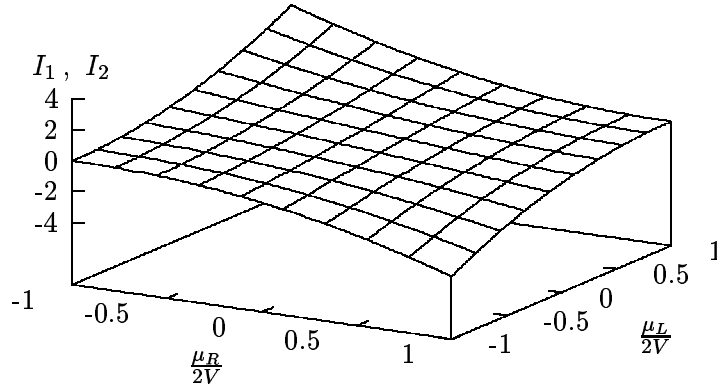


Abbildung 7.1: Wahrscheinlichkeitsstrom über $\frac{\mu_L}{2V}$ und $\frac{\mu_R}{2V}$. Für Modell 1 nach (7.15) (in Einheiten von $\frac{4\tau_0^2 V}{\pi\hbar}$) bzw. für Modell 2 nach (7.18) (in Einheiten von $\frac{4\tau_0^4 V^3}{\pi\hbar\epsilon_0^2}$).

Mit partieller Integration und [9] ergibt sich:

$$\begin{aligned} Q\left(k_i, \frac{\pi}{a}, |\lambda| > 1\right) &= -\frac{\sin ka}{a(\lambda - \cos ka)} \Big|_{k_i}^{\frac{\pi}{a}} + \int_{k_i}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{\cos ka}{\lambda - \cos ka} \\ &= \frac{\sin k_i a}{a(\lambda - \cos k_i a)} + k_i - \frac{\pi}{a} + \frac{\pi}{a} \cdot \frac{|\lambda|}{\sqrt{\lambda^2 - 1}} \\ &\quad - \frac{2\lambda}{a\sqrt{\lambda^2 - 1}} \arctan \left\{ \frac{\lambda + 1}{\sqrt{\lambda^2 - 1}} \tan \frac{k_i a}{2} \right\}. \end{aligned}$$

Ersetzt man λ durch $\cos k_\beta a$, so liefert der zweite Teil von $\rho_2^{(C)}(0, k)$ ebenfalls ein Integral der Form (7.19).

Für kleine τ_0^2 gilt:

$$\begin{aligned} \cos k_\beta a &= \beta \cosh(\Im[k_\beta a]) \approx \lambda. \quad \text{Mit} \tag{7.20} \\ \frac{1}{N_{g,2,\beta}^2(\tau_0, \lambda)} &= \tau_0^4 \cdot \frac{(e^{-2ik_\beta a} - 1)^2}{(e^{-2ik_\beta a} - 1 + 2\tau_0^2)^2} \approx \tau_0^4 \quad \text{erhält man} \\ n_2(0, t = \infty, T = 0) &= \Delta^{(0)} \cdot \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta)}{\tau_0^4 N_{g,2,\beta}^2(\tau_0, \lambda)} \\ &\quad + \frac{1}{\tau_0^2 N} \sum_{i=L,R} \left[\tau_0^4 Q(k_i, \lambda) + \sum_{\beta} \frac{\theta(\tau_0^2 - 1 + \lambda\beta) Q(k_i, \cos k_\beta a)}{N_{g,2,\beta}^2(\tau_0, \lambda)} \right] \\ &= \Delta^{(0)} + \frac{\tau_0^2 a}{\pi} \sum_{i=L,R} Q(k_i, \lambda) \tag{7.21} \\ &= \Delta^{(0)} + \frac{\tau_0^2}{\pi} \sum_{i=L,R} \left\{ \frac{\sqrt{4V^2 - \mu_i^2}}{\epsilon_0 - \mu_i} - \pi + \arccos \frac{\mu_i}{2V} + \pi \frac{|\epsilon_0|}{\sqrt{\epsilon_0^2 - 4V^2}} \right\} \end{aligned}$$

$$-\frac{2\epsilon_0}{\sqrt{\epsilon_0^2 - 4V^2}} \arctan \left(\sqrt{\frac{(\epsilon_0 + 2V)(2V - \mu_i)}{(\epsilon_0 - 2V)(2V + \mu_i)}} \right) \Bigg\}.$$

Liegt hier die lokale Energie weit ober- oder unterhalb des Energiebands, so kann man T_2 durch

$$T_2(k, \tau_0) \approx \tau_0^4 \sin^2 ka$$

abschätzen, und es ergibt sich:

$$n_2(0, \infty, 0) \approx \Delta^{(0)} + \frac{\tau_0^2}{2\pi} \sum_{i=L,R} \left\{ \pi - \arccos \frac{\mu_i}{2V} + \sqrt{4V^2 - \mu_i^2} \cdot \frac{\mu_i}{4V^2} \right\}. \quad (7.22)$$

Damit ist die Besetzungswahrscheinlichkeit:

- $n_2(0, t = \infty, T = 0) = 1$, wenn der Platz $l = 0$ vor Einschalten des Transfers besetzt war,
- proportional zu τ_0^2 , wenn der Platz unbesetzt war.

Dies läßt sich dadurch erklären, daß nur elastische Prozesse betrachtet wurden [15]. War der Platz $l = 0$ vor Einschalten des Transfers besetzt, so bleibt er wegen (7.20) auch für große Zeiten besetzt. Analoges gilt für den Fall, daß die Stelle $l = 0$ unbesetzt war.

7.4 Rein ausgedehnte Zustände im Modell 2

7.4.1 Wahrscheinlichkeitsstrom

Liegt die lokale Energie nicht dicht bei μ_i bzw. nicht zwischen μ_L und μ_R , so kann auch hier die Abschätzung (7.17) verwendet werden:

$$I_2(a, \infty, 0) = \frac{\tau_0^4}{2\pi\hbar} \left\{ \left(\frac{4V^2 - \epsilon_0^2}{(\mu_L - \epsilon_0)(\mu_R - \epsilon_0)} - 1 \right) (\mu_L - \mu_R) - \epsilon_0 \ln \left(\frac{\mu_L - \epsilon_0}{\mu_R - \epsilon_0} \right)^2 \right\}. \quad (7.23)$$

Kommt nun das chemische Potential der Resonanzenergie nahe, so übernimmt ein anderer Term des Nenners von \tilde{T}_2 die führende Rolle. Zu den weiteren Betrachtungen schätzt man deshalb \tilde{T}_2 für kleine τ_0^2 wie folgt ab:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2(E, \tau_0^2) &\approx \frac{\tau_0^4 (4V^2 - \epsilon_0^2)}{(E - \epsilon_0)^2 + \tau_0^4 (4V^2 - \epsilon_0^2)} - \frac{\tau_0^4 (E^2 - \epsilon_0^2)}{(E - \epsilon_0)^2 + \tau_0^4 (4V^2 - \epsilon_0^2)} \\ &= T_{\text{aus},1}(E, \tau_0) - T_{\text{aus},2}(E, \tau_0). \end{aligned} \quad (7.24)$$

Integriert man über $T_{\text{aus},2}(E, \tau_0)$, so ist das Ergebnis höchstens von der Ordnung τ_0^4 . Das heißt, für $\mu_i \approx \epsilon_0$ schätzt man $I_2(r = a, t = \infty, T = 0)$ durch:

$$\begin{aligned} I_2(a, \infty, 0) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T_{\text{aus},1}(E, \tau_0) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \frac{h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)}{2} \left(\arctan \frac{2(\mu_L - \epsilon_0)}{h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)} - \arctan \frac{2(\mu_R - \epsilon_0)}{h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)} \right) \quad \text{ab,} \end{aligned} \quad (7.25)$$

wobei

$$h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0) = 2\tau_0^2 \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}$$

die Halbwertsbreite der Resonanzkurve nach (3.41) ist.

Es können nun die nachfolgenden Fälle unterschieden werden:

1. $|\mu_i - \epsilon_0| \sim 1$, $i = L, R$. Falls

- Beide Potentiale größer oder kleiner als die Resonanzenergie sind, gilt nach (7.23):

$$I_2(a, \infty, 0) \sim \tau_0^4,$$

- eines der Potentiale größer und eines kleiner als ϵ_0 ist, ergibt sich

$$I_2(a, \infty, 0) = \frac{\tau_0^2 \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}}{2\hbar}, \quad (\mu_L > \mu_R),$$

also ist der Wahrscheinlichkeitsstrom in diesem Fall proportional zur Halbwertsbreite und unabhängig von den chemischen Potentialen.

Dazu betrachte man auch Abbildung 7.2.

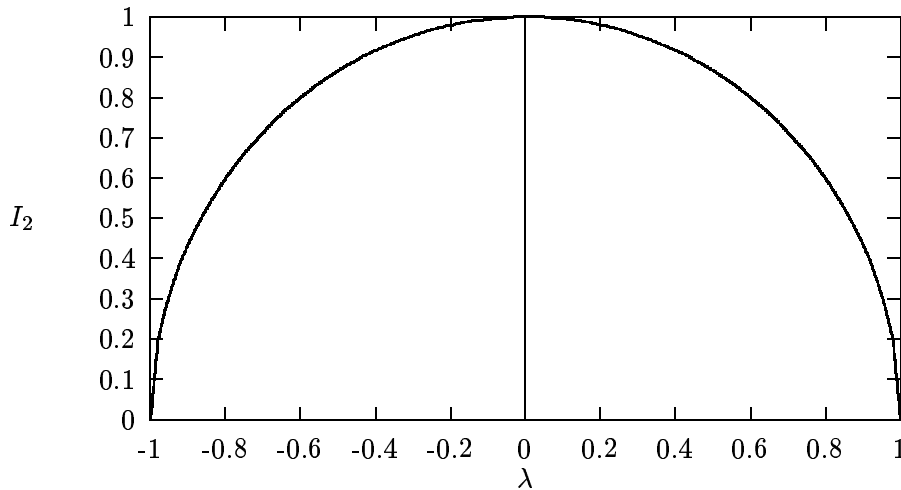


Abbildung 7.2: Wahrscheinlichkeitsstrom in Abhängigkeit von $\lambda = \frac{\epsilon_0}{2V}$ (in Einheiten von $\frac{\tau_0^2 V}{\hbar}$) in Modell 2 für rein ausgedehnte Zustände, $|\mu_i - \epsilon_0| \sim 1$ und $(\mu_L - \epsilon_0) \cdot (\mu_R - \epsilon_0) < 0$.

2. $|\mu_i - \epsilon_0| \sim \tau_0^{j_i}$.

- Ist mindestens ein $j_i \leq 2$, so gilt:

$$I_2(a, \infty, 0) \sim \tau_0^2 \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2},$$

- Ist $j_i \geq 3$, $i = L, R$, so ergibt sich:

$$I_2(a, \infty, 0) = \frac{\mu_L - \mu_R}{2\pi\hbar},$$

wobei ab $j_i \geq 4$, $i = L, R$, die Integration über $T_{\text{aus},2}$ berücksichtigt werden müßte.

Zusammenfassend ist der Wahrscheinlichkeitsstrom:

- proportional zu τ_0^4 ,
wenn μ_L und μ_R größer oder kleiner als ϵ_0 sind, und $|\mu_i - \epsilon_0|$ nicht klein ist,
- proportional zu $h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)$
in allen anderen Fällen, wenn für mindestens ein μ_i der Betrag der Differenz $\mu_i - \epsilon_0$ höchstens von der Ordnung τ_0^2 ist.

7.4.2 Besetzungswahrscheinlichkeit

Für den Fall, daß nur Blochzustände auftreten, ist nur das Integral über $T_2(k, \tau_0)$ relevant. Liegt ϵ_0 nicht zu nahe bei μ_i , so ist das Integral (7.19) für $|\lambda| < 1$ zu berechnen:

$$Q\left(k_i, \frac{\pi}{a}, |\lambda| < 1\right) = \left(-\frac{\sin ka}{a(\lambda - \cos ka)} - k + \frac{\lambda}{a\sqrt{1-\lambda^2}} \ln \frac{|(1+\lambda)\tan\frac{ka}{2} + \sqrt{1-\lambda^2}|}{|(1+\lambda)\tan\frac{ka}{2} - \sqrt{1-\lambda^2}|}\right) \Bigg|_{k_i}^{\frac{\pi}{a}}. \quad (7.26)$$

Auch hier sind mehrere Fälle zu unterscheiden:

1. Liegt μ_i weit unterhalb von ϵ_0 , so gilt wegen (7.26) und (7.10):

$$\begin{aligned} n(\mu_i) &= \frac{\tau_0^2 a}{2\pi} Q\left(k_i, \frac{\pi}{a}, |\lambda| < 1\right) \\ &= \frac{\tau_0^2}{2\pi} \left\{ \frac{\sqrt{4V^2 - \mu_i^2}}{\epsilon_0 - \mu_i} - \pi + \arccos \frac{\mu_i}{2V} - \frac{\epsilon_0}{\sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}} \ln \frac{2V(\epsilon_0 - \mu_i)}{4V^2 - \epsilon_0\mu_i + \sqrt{(4V^2 - \epsilon_0^2)(4V^2 - \mu_i^2)}} \right\} \\ &\sim \tau_0^2. \end{aligned} \quad (7.27)$$

2. Liegt μ_i weit oberhalb von ϵ_0 , so ist wegen (4.38) und der Vollständigkeit:

$$\begin{aligned} n(\mu_i) &= \frac{1}{\tau_0^2 N} \int_{k_i}^{\frac{\pi}{a}} dk T_2(k, \tau_0) = \frac{1}{\tau_0^2 N} \left(\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk T_2(k, \tau_0) + \int_{k_i}^0 dk T_2(k, \tau_0) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{a}{\tau_0^2 \pi} \int_{k_i}^0 dk T_2(k, \tau_0) \right) \approx \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tau_0^2 a}{\pi} Q(k_i, 0, |\lambda| < 1) \right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{\tau_0^2}{2\pi} \left\{ -\frac{\sqrt{4V^2 - \mu_i^2}}{\mu_i - \epsilon_0} + \arccos \frac{\mu_i}{2V} - \frac{\epsilon_0}{\sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}} \ln \frac{2V(\mu_i - \epsilon_0)}{4V^2 - \epsilon_0\mu_i + \sqrt{(4V^2 - \epsilon_0^2)(4V^2 - \mu_i^2)}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Also ist in den beiden letztgenannten Fällen die Änderung der Besetzung proportional zu τ_0^2 .

3. Liegt μ_i in der Nähe von ϵ_0 , so wird in $n(\mu_i)$ k durch E substituiert:

$$n(\mu_i) = \frac{1}{\tau_0^2 N} \int_{k_i}^{\frac{\pi}{a}} dk T_2(k, \tau_0) = \frac{1}{2\pi\tau_0^2} \int_{-2V}^{\mu_i} dE \frac{\tilde{T}_2(E, \tau_0)}{\sqrt{4V^2 - E^2}}.$$

Nach Abschätzung des Nenners wie in (7.24) erhält man:

$$n(\mu_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-2V}^{\mu_i} dE \frac{\tau_0^2 \sqrt{4V^2 - E^2}}{(E - \epsilon_0)^2 + \tau_0^4 (4V^2 - \epsilon_0^2)}. \quad (7.29)$$

Ersetzt man den Zähler durch $\sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}$, so ändert sich der Teil des Integrals, wo

- E weit unterhalb von ϵ_0 liegt nur in der Ordnung τ_0^2 ,
- $E \approx \epsilon_0$ nur geringfügig, denn dort gilt:

$$\sqrt{4V^2 - E^2} \approx \sqrt{4V^2 - \epsilon_0^2}.$$

Analog zu (7.25) erhält man:

$$n(\mu_i) \approx \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\pi}{2} + \arctan \frac{2(\mu_i - \epsilon_0)}{h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)} \right). \quad (7.30)$$

Nehmen wir an, daß $\mu_L \approx \mu_R \approx \mu$, so ergibt sich zusammenfassend:

- $n_2(r=0, t=\infty, T=0) \sim \tau_0^2$, falls μ weit unterhalb von ϵ_0 liegt,
- $[1 - n_2(0, \infty, 0)] \sim \tau_0^2$, falls μ weit oberhalb von ϵ_0 liegt.
- Liegt μ in der Nähe von ϵ_0 , so ergibt sich für n_2 :

$$n_2(0, \infty, 0) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \frac{2(\mu - \epsilon_0)}{h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)}, \quad (7.31)$$

die Besetzungswahrscheinlichkeit hängt also mit dem Arkustangens des Quotienten aus Abstand des chemischen Potentials von der Resonanzenergie und der halben Halbwertsbreite der Resonanzkurve zusammen. Man betrachte dazu auch Abbildung 7.3. Eine Veränderung von ϵ_0 bringt quasi nur eine Verschiebung der dargestellten Kurve mit sich.

- Liegt μ sehr dicht bei ϵ_0 ($O(\mu - \epsilon_0) \approx \tau_0^j$, $j \geq 3$), so gilt:

$$n_2(0, \infty, 0) - \frac{1}{2} = \frac{2(\mu - \epsilon_0)}{\pi \cdot h_{2,B}(\tau_0, \epsilon_0)}. \quad (7.32)$$

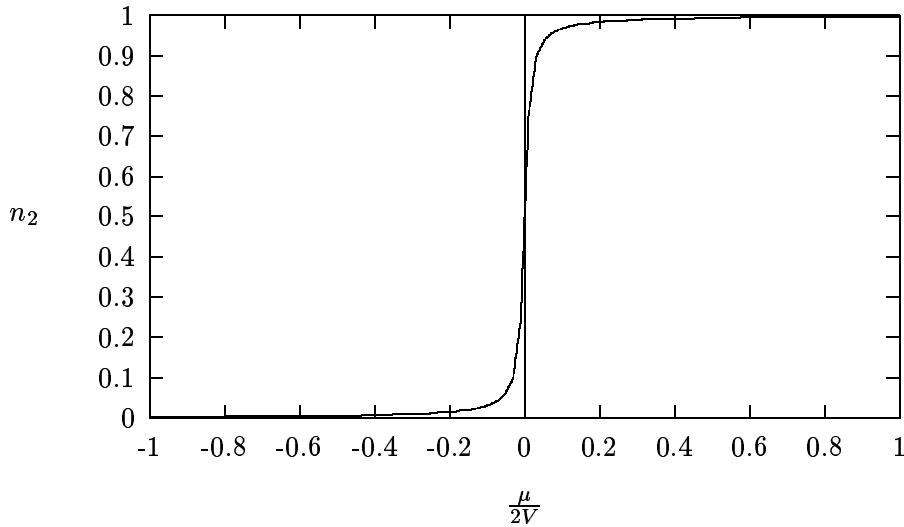


Abbildung 7.3: Besetzungswahrscheinlichkeit über $\frac{\mu}{2V}$ für $\mu_L = \mu_R = \mu$, $\tau_0 = 0.1$ und $\epsilon_0 = 0$ im Resonanzfall.

7.5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zwei Modelle eines elektrischen Kontakts betrachtet. Der Kontakt verband zwei Teilchenreservoirs und bestand im Modell 1 aus der Verbindung zwischen zwei Plätzen und im Modell 2 aus einer ausgezeichneten Stelle. Die Elektronen wurden durch das Modell stark gebundener Elektronen beschrieben, der Kontakt manifestierte sich in einem veränderten Transfer.

Der zeitunabhängige Teil der Arbeit umfaßte die Bestimmung der Eigenzustände und Transmissionskoeffizienten und den Nachweis von Orthogonalität und Vollständigkeit. Die Vielzahl der auftretenden Fälle wurde durch die Wahl der Parameter τ und ϵ_0 eingeschränkt. Die Zeitabhängigkeit wurde so eingebunden, daß zum Zeitpunkt $t = 0$ der Transfer eingeschaltet wurde. Gegenstand weiterer Betrachtungen waren der Wahrscheinlichkeitsstrom pro Zustand in beiden Modellen und zusätzlich die Besetzungswahrscheinlichkeit pro Zustand der ausgezeichneten Stelle in Modell 2. Für große Zeiten konnten durch Anwendung des Residuensatzes, Abschätzung der zusätzlichen Weganteile und nachfolgende Integration über die besetzten Zustände Wahrscheinlichkeitsstrom und Besetzung berechnet werden.

Für die Temperatur $T = 0$ und kleine Differenzen der chemischen Potentiale konnte so die Zwei-Punkt-Landauer-Formel bestätigt werden.

Bei genaueren Untersuchungen konnte für einen stark behinderten Transport über die Kontaktstelle in Modell 1 und falls in Modell 2 ein lokalisierter Zustand vorlag, ein zur Differenz der chemischen Potentiale proportionaler Strom festgestellt werden. Das läßt sich durch die Betrachtung von ausschließlich elastischen Prozessen erklären und entspricht somit den Erwartungen. Im Resonanzfall war der Strom proportional zur Halbwertsbreite des Transmissionskoeffizienten, wenn die Resonanzenergie zwischen den chemischen Potentialen lag.

Die Besetzungswahrscheinlichkeit änderte sich nur geringfügig, wenn ein gebundener Zustand durch die Wahl von τ_0 und ϵ_0 gegeben war. Für Modell 1 war der Strom proportional zu τ_0^2 , für Modell 2 proportional zu τ_0^4 . Für rein ausgedehnte Zustände stieg mit laufendem chemischem Potential die Besetzung nur in der Nähe der Resonanzregion sehr stark. Die Steigung ist dort proportional zum Kehrwert der Halbwertsbreite.

7.6 Ausblick

Realistischer als die betrachteten Systeme wären solche, bei denen rechtes und linkes Reservoir das gleiche chemische Potential μ besäßen und der Transfer zeitlich konstant wäre. Ab dem Zeitpunkt $t_0 = 0$ sollten sich die elektrischen Potentiale um einen konstanten Wert U unterscheiden.

Für Zeiten $t < 0$ könnten die in dieser Arbeit vorgestellten Modelle Verwendung finden. Für Zeiten $t > 0$ nähmen die lokalen Energien in beiden Reservoiren unterschiedliche Werte an:

$$\epsilon_L - \epsilon_R = eU,$$

wobei e die Elementarladung ist.

ϵ_L	ϵ_L	ϵ_L	ϵ_R	ϵ_R	ϵ_R	lokale Energie
○	○	○	○	○	○	
-2	-1	0	1	2	3	Platznummer

Abbildung 7.4: Modell 1 bei anliegender Spannung U

Es könnte nun in der vorgestellten Art und Weise vorgegangen werden, wobei allerdings schon die Betrachtung der Eigenzustände komplexer und damit mehr Mühe bereiten würde.

Als Ergebnis erwartet man die gleichen Zusammenhänge [3], wobei:

$$\mu_L - \mu_R \hat{=} eU,$$

man müßte allerdings die unterschiedliche Befüllung der Reservoire berücksichtigen:

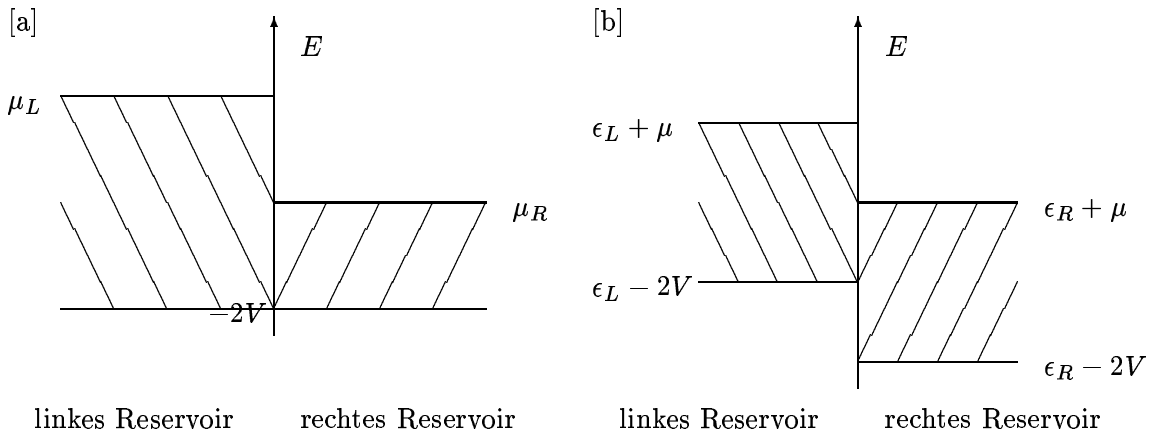


Abbildung 7.5: Befüllung der Reservoire [a] gemäß dieser Arbeit [b] gemäß Ausblick.

Anhang A

Exponentialreihen

Gegenstand der Betrachtung sind Reihen der Form

$$\sum_j e^{ikaj}.$$

Sie sind als divergent anzusehen und werden deshalb im Distributionensinn behandelt.

A.1 Berechnung mit Fourierreihen

Sei $f(k)$ eine L -periodische Funktion ($L = \frac{2\pi}{a}$). Dann kann f in eine Fourierreihe entwickelt werden, und es gilt [7]:

$$f(k) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j \exp\left\{\frac{i2\pi k j}{L}\right\} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j e^{ikaj}, \quad (\text{A.1})$$

wobei die Koeffizienten c_j gegeben sind durch:

$$c_j = \frac{1}{L} \int_{k_0}^{k_0+L} dk_1 f(k_1) \exp\left\{\frac{-i2\pi k_1 j}{L}\right\} = \frac{a}{2\pi} \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} dk_1 f(k_1) e^{-ik_1 a j}, \quad (\text{A.2})$$

k_0 sei beliebig, aber fest.

(A.2) in (A.1) eingesetzt, ergibt:

$$f(k_2) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{a}{2\pi} \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} dk_1 f(k_1) e^{i(k_2-k_1)aj}. \quad (\text{A.3})$$

Das Vertauschen von Summation und Integration und die Wahl $k_0 := -\frac{\pi}{a}$ liefern:

$$f(k_2) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_1 f(k_1) \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(e^{i(k_2-k_1)aj}\right). \quad (\text{A.4})$$

Für ein beliebiges k_2 gilt:

$$k_2 \in \left((2l-1)\frac{\pi}{a}, (2l+1)\frac{\pi}{a} \right], \quad l \in \mathcal{Z} \quad \Rightarrow \quad \|\exists := \left(\|\epsilon - \frac{\epsilon\pi}{\downarrow} \updownarrow \right) \in \left(-\frac{\pi}{\downarrow}, \frac{\pi}{\downarrow} \right]. \quad (\text{A.5})$$

Wegen der Periodizität von f und mit Hilfe der Diracschen δ -Funktion verifiziert man:

$$f(k_2) = f\left(k_3 + \frac{2\pi l}{a}\right) = f(k_3) = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_1 f(k_1) \delta(k_3 - k_1). \quad (\text{A.6})$$

Vergleicht man (A.4) mit (A.6), so erkennt man:

$$\frac{a}{2\pi} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(e^{i(k_2 - k_1)aj} \right) = \delta\left(k_2 - k_1 - \frac{2\pi l}{a}\right), \quad (\text{A.7})$$

falls $k_2 \in \left((2l-1)\frac{\pi}{a}, (2l+1)\frac{\pi}{a} \right]$ gilt.

Setzt man (A.7) in (A.4) ein, so gilt $f(k_2) = 0$, falls $k_2 \notin \left((2l-1)\frac{\pi}{a}, (2l+1)\frac{\pi}{a} \right]$ ist. Es liegt nun nahe, daß man für jedes Intervall $\left((2l-1)\frac{\pi}{a}, (2l+1)\frac{\pi}{a} \right]$, $l \in \mathcal{Z}$ die δ -Funktion $\delta(k_2 - k_1 - \frac{2\pi l}{a})$ einführt und dann über alle l summiert.

Definiert man k gemäß $k := k_2 - k_1$, so erhält man schließlich:

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikaj} = \frac{2\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi l}{a}\right), \quad \forall k \in \mathcal{R}. \quad (\text{A.8})$$

Ist k aus einer beschränkten Menge, so sind nur diejenigen δ -Funktionen zu betrachten, deren Argument Null werden kann.

Weiterhin kann man folgern:

$$\begin{aligned} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ikaj} &= \sum_{j=-\infty}^{-1} e^{ikaj} + 1 + \sum_{j=1}^{\infty} e^{ikaj} = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} e^{-ikaj} + e^{ikaj} = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \cos kaj \\ &\Rightarrow \sum_{j=1}^{\infty} \cos kaj = -\frac{1}{2} + \frac{\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi l}{a}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Eine Formel für $\sum_{j=1}^{\infty} \sin kaj$ läßt sich aus obigem nicht herleiten. Hierzu wähle man einen anderen Weg.

A.2 Konvergenzerzeugende Faktoren

Man versehe den Summanden c_j der Reihe:

$$\sum_{j=1}^{\infty} c_j = \sum_{j=1}^{\infty} e^{ikaj}$$

mit dem Faktor $e^{-\epsilon j}$, $\epsilon > 0$. Damit stellt

$$S(k, \epsilon) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{ikaj} e^{-\epsilon j}$$

eine geometrische Reihe dar, und es gilt für reelle k :

$$\begin{aligned} S(k, \epsilon) &= \frac{1}{1 - e^{ika} e^{-\epsilon}} - 1 = \frac{e^{ika} e^{-\epsilon}}{1 - e^{ika} e^{-\epsilon}} \\ S^*(k, \epsilon) &= S(-k, \epsilon). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A.2.1 Betrachtung von $\sin(ka/2) S(k, \epsilon)$

Aus (A.10) folgt:

$$\begin{aligned} S(k, \epsilon) &= \frac{e^{\imath ka/2} e^{-\epsilon/2}}{e^{-\imath ka/2} e^{\epsilon/2} - e^{\imath ka/2} e^{-\epsilon/2}} = \frac{e^{\imath(ka+\imath\epsilon)/2}}{e^{-\imath(ka+\imath\epsilon)/2} - e^{\imath(ka+\imath\epsilon)/2}} \\ &= \frac{\imath e^{\imath(ka+\imath\epsilon)/2}}{2 \sin[(ka + \imath\epsilon)/2]} = \frac{1}{2} \left(-1 + \imath \cot \frac{(ka + \imath\epsilon)}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Für $k \neq 2\pi l$, $l \in \mathcal{Z}$ ergibt sich:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(k, \epsilon) = \frac{\imath e^{\imath ka/2}}{2 \sin(ka/2)} = \frac{1}{2} \left(-1 + \imath \cot \frac{ka}{2} \right), \quad (\text{A.12})$$

Der Fall $k = 2\pi l$, $l \in \mathcal{Z}$ ist wegen der Divergenz von S problematischer. Man betrachtet hier $S(k, \epsilon) \cdot \sin \frac{ka}{2}$ und definiert:

$$U(k, 0) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(k, \epsilon) \cdot \sin \frac{ka}{2} = \frac{1}{2} \imath e^{\imath ka/2} \quad (\text{A.13})$$

$$U(0, 0) := \lim_{k \rightarrow 0} U(k, 0) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{2} \imath e^{\imath ka/2} = \frac{\imath}{2}. \quad (\text{A.14})$$

Damit ist $U(0, 0)$ die stetige Fortsetzung von $U(k, 0)$.

A.2.2 Darstellung mit δ -Funktion und Hauptwert

Die Zerlegung in Real- und Imaginärteil liefert:

$$\begin{aligned} S(k, \epsilon) &= \frac{\cos ka - e^{-\epsilon} + \imath \sin ka}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} = \frac{(2 \cos ka - e^{-\epsilon} - e^{\epsilon}) - e^{-\epsilon} + e^{\epsilon}}{4(\cosh \epsilon - \cos ka)} + \imath \frac{\sin ka}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} \\ \Leftrightarrow S(k, \epsilon) &= \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\sinh \epsilon}{(\cosh \epsilon - \cos ka)} + \imath \frac{\sin ka}{(\cosh \epsilon - \cos ka)} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Andererseits gilt:

$$S(k, \epsilon) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} (\cos kaj + \imath \sin kaj) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \cos kaj + \imath \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \sin kaj. \quad (\text{A.16})$$

Der Vergleich von (A.15) und (A.16) liefert:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \cos kaj &= -\frac{1}{2} + \frac{\sinh \epsilon}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} \\ \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \sin kaj &= \frac{\sin ka}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Nun sollen die Grenzwerte für $\epsilon \rightarrow 0$ berechnet werden. Man setze dazu:

$$\zeta := \sqrt{\frac{\cosh \epsilon - 1}{2}} \quad \Leftrightarrow \quad \cosh \epsilon = 2\zeta^2 + 1, \quad x := \sin \frac{ka}{2}.$$

Damit ergibt sich:

$$\frac{\sinh \epsilon}{\cosh \epsilon - \cos ka} = \sqrt{\zeta^2 + 1} \frac{\zeta}{\zeta^2 + x^2}, \quad \frac{\sin ka}{\cosh \epsilon - \cos ka} = \frac{x (\pm \sqrt{1 - x^2})}{\zeta^2 + x^2}. \quad (\text{A.18})$$

Da die δ -Funktion durch die Funktionenfolge δ_ζ , mit:

$$\delta_\zeta(x) = \frac{\zeta}{\pi(\zeta^2 + x^2)}$$

für $\zeta \rightarrow 0$ approximiert werden kann und da ζ gegen Null geht, falls ϵ gegen Null konvergiert, gilt Nachstehendes:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sinh \epsilon}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} = \lim_{\zeta \rightarrow 0} \sqrt{\zeta^2 + 1} \frac{\zeta}{2(\zeta^2 + x^2)} = \frac{\pi}{2} \delta(x) = \frac{\pi}{2} \delta\left(\sin \frac{ka}{2}\right). \quad (\text{A.19})$$

Mit der Beziehung:

$$\delta[g(k)] = \sum_l \frac{1}{|g'(k_l)|} \delta(k - k_l), \quad g(k_l) = 0, \quad g'(k_l) \neq 0 \quad (\text{A.20})$$

ergibt sich für $g(k) = \sin \frac{ka}{2}$:

$$k_l = \frac{2\pi}{a} l, \quad g'(k) = \frac{a}{2} \cos \frac{ka}{2} \quad \Rightarrow \quad |g'(k_l)| = \frac{a}{2} |\cos l\pi| = \frac{a}{2}, \quad \forall l \in \mathcal{Z}.$$

Das bedeutet, daß

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sinh \epsilon}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} = \frac{\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} l\right), \quad (\text{A.21})$$

was (A.9) bestätigt.

Eine Aussage über die Sinusreihe erhält man mit Hilfe der folgenden Formel:

$$\lim_{\zeta \rightarrow 0} \frac{x f(x)}{x^2 + \zeta^2} = \mathcal{P} \frac{\{(\zeta)\}}{\zeta}, \quad (\text{A.22})$$

wobei \mathcal{P} der Cauchysche Hauptwert ist. Aus diesem Grund gilt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sin ka}{2(\cosh \epsilon - \cos ka)} = \frac{1}{2} \mathcal{P} \cot \frac{\|\cdot\|}{\epsilon} = \frac{\infty}{\epsilon} \mathcal{P} \frac{\sin \|\cdot\|}{\infty - \cos \|\cdot\|}. \quad (\text{A.23})$$

Zusammenfassend:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} \cos kaj &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \cos kaj = -\frac{1}{2} + \frac{\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} l\right) \\ \sum_{j=1}^{\infty} \sin kaj &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\epsilon j} \sin kaj = \frac{1}{2} \mathcal{P} \frac{\sin \|\cdot\|}{\infty - \cos \|\cdot\|} \\ \sum_{j=1}^{\infty} e^{i kaj} &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{\infty} e^{(i ka - \epsilon) j} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(k, \epsilon) \\ &= \frac{1}{2} \left[-1 + \frac{2\pi}{a} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k - \frac{2\pi}{a} l\right) + i \mathcal{P} \frac{\sin \|\cdot\|}{\infty - \cos \|\cdot\|} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Anhang B

Ergänzungen zur Vollständigkeit

B.1 Partialbruchzerlegungen

Im allgemeinen lautet der Ansatz für die Partialbruchzerlegung von $\tilde{B}_{s,b}(z, \tau) z^{-(j+1)}$ gemäß (4.47):

$$\frac{\tilde{b}_{s,b}(z, \tau)}{[z - d_{s,1}(\tau)][z - d_{s,2}(\tau)] z^{j+1}} = \frac{a_{j,s,1}(\tau)}{z - d_{s,1}(\tau)} + \frac{a_{j,s,2}(\tau)}{z - d_{s,2}(\tau)} + \sum_{n=1}^{j+1} \frac{b_{j,s,n}(\tau)}{z^n}.$$

Die Multiplikation mit dem Hauptnenner führt zu:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_{s,b}(z, \tau) &= [a_{j,s,1}(\tau)(z - d_{s,2}(\tau)) + a_{j,s,2}(\tau)(z - d_{s,1}(\tau))] z^{j+1} \\ &+ [z - d_{s,1}(\tau)][z - d_{s,2}(\tau)] \sum_{n=1}^{j+1} b_{j,s,n}(\tau) z^{j+1-n}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Setzt man die Nullstellen des Nenners in (B.1) ein, so erhält man die Konstanten $a_{j,s,1}(\tau)$ und $a_{j,s,2}(\tau)$:

$$\begin{aligned} z = d_{s,1}(\tau) &\Rightarrow a_{j,s,1}(\tau) = \frac{\tilde{b}_{s,b}(d_{s,1}(\tau), \tau)}{[d_{s,1}(\tau) - d_{s,2}(\tau)] [d_{s,1}(\tau)]^{j+1}}, \\ z = d_{s,2}(\tau) &\Rightarrow a_{j,s,2}(\tau) = \frac{\tilde{b}_{s,b}(d_{s,2}(\tau), \tau)}{[d_{s,2}(\tau) - d_{s,1}(\tau)] [d_{s,2}(\tau)]^{j+1}}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

B.1.1 Die Koeffizienten $b_{j,s,n}(\tau)$

Da $\tilde{b}_{s,b}(z, \tau)$ ein Polynom nullten oder ersten Grades ist, ergibt sich $b_{j,s,1}(\tau)$ aus dem Vergleich der Koeffizienten $(j+2)$ -ten Grades:

$$b_{j,s,1}(\tau) = -[a_{j,s,1}(\tau) + a_{j,s,2}(\tau)]. \quad (\text{B.3})$$

- Sind die Nullstellen des Nenners reell, so folgt aus dem Koeffizientenvergleich in (B.1) und aus der Reellwertigkeit von $a_{j,s,i}(\tau)$, daß $b_{j,s,n}(\tau)$ für alle möglichen Werte von n reell ist.
- Sind die Nullstellen des Nenners hingegen komplexe Zahlen, so gilt:

$$d_{s,2}(\tau) = d_{s,1}^*(\tau), \quad (\text{B.4})$$

da $[z - d_{s,1}(\tau)][z - d_{s,2}(\tau)]$ ein Polynom mit reellen Koeffizienten ist.

Dann gelten die folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned}\tilde{b}_{s,b}(d_{s,2}(\tau), \tau) &= \tilde{b}_{s,b}^*(d_{s,1}(\tau), \tau) \\ d_{s,2}(\tau) - d_{s,1}(\tau) &= [d_{s,1}(\tau) - d_{s,2}(\tau)]^* \\ [d_{s,2}(\tau)]^{j+1} &= \left[[d_{s,1}(\tau)]^{j+1} \right]^*,\end{aligned}\tag{B.5}$$

und deshalb $a_{j,s,2}(\tau) = a_{j,s,1}^*(\tau)$.

Das bedeutet, daß

$$\begin{aligned}a_{j,s,1}(\tau) + a_{j,s,2}(\tau) &= 2\Re [a_{j,s,1}(\tau)] && \text{und} \\ a_{j,s,1}(\tau) d_{s,2}(\tau) + a_{j,s,2}(\tau) d_{s,1}(\tau) &= 2\Re [a_{j,s,1}(\tau) \cdot d_{s,1}^*(\tau)] && \text{in } \mathcal{R} \text{ liegen,}\end{aligned}\tag{B.6}$$

und somit $b_{j,s,n}(\tau)$ für jedes mögliche n ebenfalls reell ist.

Also sind die Koeffizienten $b_{j,s,n}(\tau)$ in jedem Fall reellwertig.

B.1.2 Berechnung der Koeffizienten für $s = 1$

$$\begin{aligned}\text{Aus} & \tilde{b}_{1,b}(\tau) = -(1 - \tau^2) \\ \text{und} & [z - d_{1,1}(\tau)][z - d_{1,2}(\tau)] = z^2 - \tau^2 \quad \text{folgt:}\end{aligned}$$

1.Fall: $\tau^2 = 1$

In diesem Fall wird der Integrand Null und es gilt: $I_{j,1}(\tau) = \frac{\pi}{a} \delta_{j0}$.

2.Fall: $\tau^2 \neq 1$

$$\begin{aligned}d_{1,1}(\tau) &= \tau & d_{1,2}(\tau) &= -\tau \\ a_{j,1,1}(\tau) &= -\frac{1 - \tau^2}{2\tau^{j+2}} & a_{j,1,2}(\tau) &= -\frac{1 - \tau^2}{2(-\tau)^{j+2}} \\ b_{j,1,1}(\tau) &= \frac{1 - \tau^2}{2} \left(\frac{1}{\tau^{j+2}} + \frac{1}{(-\tau)^{j+2}} \right) = \frac{1 - \tau^2}{\tau^{j+2}} \begin{cases} 1 & j \text{ gerade} \\ 0 & j \text{ ungerade} \end{cases}.\end{aligned}\tag{B.7}$$

B.1.3 Berechnung der Koeffizienten für $s = 2$

$$\begin{aligned}\text{Es gilt:} & \tilde{b}_{2,b}(z, \tau) = 2[\lambda z - (1 - \tau^2)] \\ \text{und} & [z - d_{2,1}(\tau)][z - d_{2,2}(\tau)] = z^2 - 2\lambda z + (1 - 2\tau^2).\end{aligned}$$

Hier gilt es, drei Spezialfälle abzuspalten, bei denen die Partialbruchzerlegung von (4.47) abweicht:

1. Fall: $\lambda = 1 - \tau^2$

Unter diesen Umständen gelten die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned}\tilde{b}_{2,b}(z, \tau) &= 2(1 - \tau^2)(z - 1) \\ [z - d_{2,1}(\tau)][z - d_{2,2}(\tau)] &= z^2 - 2(1 - \tau^2)z + (1 - 2\tau^2) = (z - 1)[z - (1 - 2\tau^2)].\end{aligned}$$

Damit weisen Zähler und Nenner den Faktor $(z - 1)$ auf, was zu nachstehender Partialbruchzerlegung führt.

$$\frac{\tilde{B}_{2,b}(z, \tau)}{z^{j+1}} = \frac{a_{j,2,2}(\tau)}{z - (1 - 2\tau^2)} + \sum_{n=1}^{j+1} \frac{b_{j,2,n}(\tau)}{z^n} = \frac{2(1 - \tau^2)}{[z - (1 - 2\tau^2)] z^{j+1}},$$

also

$$a_{j,2,2}(\tau) = \frac{2(1 - \tau^2)}{(1 - 2\tau^2)^{j+1}} = -b_{j,2,1}(\tau). \quad (\text{B.8})$$

2. Fall: $\lambda = \tau^2 - 1$

Nun gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_{2,b}(z, \tau) &= -2(1 - \tau^2)(z + 1) \\ [z - d_{2,1}(\tau)][z - d_{2,2}(\tau)] &= z^2 + 2(1 - \tau^2)z + (1 - 2\tau^2) = [z + (1 - 2\tau^2)](z + 1). \end{aligned}$$

analog zu Fall 1 erhält man ($a_{j,2,2}(\tau)$ durch $a_{j,2,1}(\tau)$ ersetzt):

$$a_{j,2,1}(\tau) = \frac{-2(1 - \tau^2)}{[-(1 - 2\tau^2)]^{j+1}}. \quad (\text{B.9})$$

Gelten die beiden Fälle gleichzeitig, d. h. $\lambda = 0$ und $\tau = 1$, so wird $\tilde{b}_{2,b}(z, \tau) \equiv 0$ und damit $I_{j,2}(\tau) = \frac{\pi}{a} \delta_{j0}$.

3. Fall: $\lambda^2 - (1 - 2\tau^2) = 0$

Jetzt ergibt sich:

$$[z - d_{2,1}(\tau)][z - d_{2,2}(\tau)] = z^2 - 2\lambda z + \lambda^2 = (z - \lambda)^2.$$

Deshalb lautet der Ansatz der Partialbruchzerlegung:

$$\frac{\tilde{b}_{2,b}(z, \tau)}{(z - \lambda)^2 z^{j+1}} = \frac{a_{j,2,1}(\tau)}{z - \lambda} + \frac{a_{j,2,2}(\tau)}{(z - \lambda)^2} + \sum_{n=1}^{j+1} \frac{b_{j,2,n}(\tau)}{z^n}. \quad (\text{B.10})$$

Die Multiplikation mit dem Hauptnenner und das Einsetzen der Nullstellen des Nenners liefern:

$$a_{j,2,2}(\tau) = \frac{2[\lambda^2 - (1 - \tau^2)]}{\lambda^{j+1}}. \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{b}_{2,b}(z, \tau) - a_{j,2,2}(\tau) z^{j+1}}{z - \lambda} &= \frac{2}{(z - \lambda) \lambda^{j+1}} \left\{ [\lambda z - (1 - \tau^2)] \lambda^{j+1} - [\lambda^2 - (1 - \tau^2)] z^{j+1} \right\} \\ &= \frac{2}{(z - \lambda) \lambda^{j+1}} \left\{ -\lambda^2 z (z^j - \lambda^j) + (1 - \tau^2)(z^{j+1} - \lambda^{j+1}) \right\} \\ &= 2\lambda^{-(j+1)} \left\{ -\lambda^2 z \sum_{n=0}^{j-1} \lambda^n z^{j-1-n} + (1 - \tau^2) \sum_{n=0}^j \lambda^n z^{j-n} \right\} \\ &= a_{j,2,1}(\tau) z^{j+1} + \sum_{n=1}^{j+1} b_{j,2,n}(\tau) z^{j+1-n} (z - \lambda). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Einsetzen von $z = \lambda$ ergibt:

$$a_{j,2,1}(\tau) = 2\lambda^{-2(j+1)} \left\{ (1-\tau^2)(j+1)\lambda^j - j\lambda^{j+2} \right\} = \frac{2[(j+1)(1-\tau^2) - j\lambda^2]}{\lambda^{j+2}}. \quad (\text{B.13})$$

In den beiden letzten Fällen gilt:

$$b_{j,2,1}(\tau) = -a_{j,2,1}(\tau). \quad (\text{B.14})$$

Zu betrachten bleiben noch zwei Fälle, bei denen die Partialbruchzerlegung (4.47) gilt:

4. Fall: $\lambda^2 - (1 - 2\tau^2) > 0$ und $|\lambda| \neq |1 - \tau^2|$

$$\begin{aligned} d_{2,1}(\tau) &= \lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} & d_{2,2}(\tau) &= \lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)}, \\ a_{j,2,1}(\tau) &= \frac{\lambda \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)}{\sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \left[\lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{j+1}} & (\text{B.15}) \\ a_{j,2,2}(\tau) &= -\frac{\lambda \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right] - (1 - \tau^2)}{\sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \left[\lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right]^{j+1}}. \end{aligned}$$

5. Fall: $\lambda^2 - (1 - 2\tau^2) < 0$

$$\begin{aligned} d_{2,1}(\tau) &= \lambda + i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} & d_{2,2}(\tau) &= \lambda - i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2}, \\ a_{j,2,1}(\tau) &= \frac{\lambda \left[\lambda + i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \right] - (1 - \tau^2)}{i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \left[\lambda + i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \right]^{j+1}} & (\text{B.16}) \\ a_{j,2,2}(\tau) &= -\frac{\lambda \left[\lambda - i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \right] - (1 - \tau^2)}{i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \left[\lambda - i\sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} \right]^{j+1}}. \end{aligned}$$

Gemäß (B.3) gilt für die letzten beiden Fälle:

$$b_{j,2,1}(\tau) = -[a_{j,2,1}(\tau) + a_{j,2,2}(\tau)]. \quad (\text{B.17})$$

Bemerkung

Neben den oben aufgeführten Fällen gibt es noch weitere, bei denen eine abweichende Partialbruchzerlegung auftritt (z. B. für $s = 2$, $\tau^2 = \frac{1}{2}$ oder der "Unterfall" 3.1.: $\lambda = 0$). Da sie im weiteren Verlauf keine Rolle spielen, werden sie an dieser Stelle nicht betrachtet.

B.2 Berechnung des Wegintegrals

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, einen Ausdruck für

$$\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z}$$

anzugeben.

Zur Berechnung des Wegintegrals werden Sätze der Funktionentheorie herangezogen [10].

Sei \tilde{G} ein Gebiet mit

$$\tilde{G} = \left\{ z \in \mathcal{C} : -\frac{\pi}{\epsilon} < \Im [z] < \frac{\exists\pi}{\epsilon} \right\}. \quad (\text{B.18})$$

Die Exponentialfunktion bildet \tilde{G} bijektiv auf das Gebiet G mit

$$G = \mathcal{C} \setminus \{-i\mathfrak{s} : \mathfrak{s} \in \mathcal{R}_l^+\} \quad \text{ab.} \quad (\text{B.19})$$

G ist die längs der negativen imaginären Achse aufgeschnittene Ebene. Die Umkehrfunktion der Exponentialfunktion ist dann ein Zweig des Logarithmus auf G .

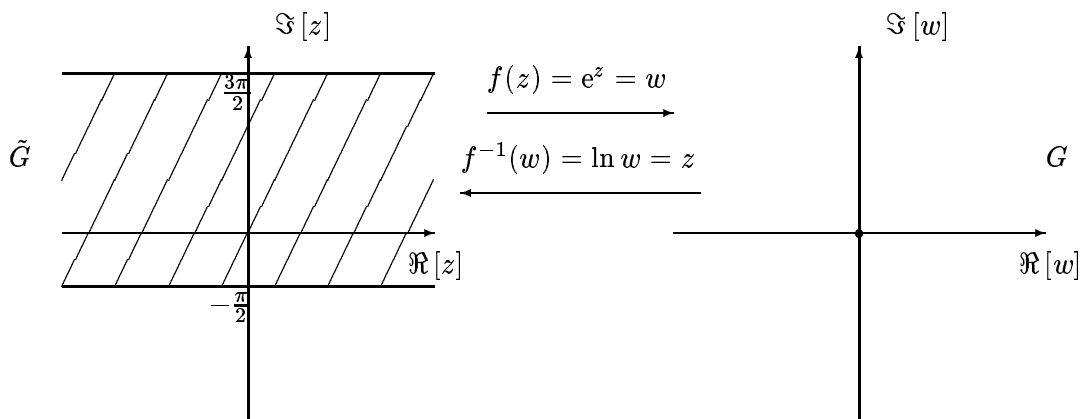


Abbildung B.1: Abbildung des Gebiets \tilde{G} durch die Exponentialfunktion

Damit besitzt $f(z) = z^{-1}$ eine Stammfunktion auf G , z. B.

$$F(z) = \ln z = \ln |z| + i \arg\{z\}, \quad -\frac{\pi}{2} < \arg\{z\} < \frac{3\pi}{2}, \quad (\text{B.20})$$

also den Zweig des Logarithmus auf G . Deshalb gilt:

$$\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} = \ln \left[\gamma_{s,m} \left(\frac{\pi}{a} \right) \right] - \ln \left[\gamma_{s,m}(0) \right] + i \left[\arg \left\{ \gamma_{s,m} \left(\frac{\pi}{a} \right) \right\} - \arg \left\{ \gamma_{s,m}(0) \right\} \right], \quad (\text{B.21})$$

wenn $\gamma_{s,m}$ ein Weg in G ist.

Zwei Dinge müssen noch ausgeführt werden:

- Es ist noch zu zeigen, daß $\gamma_{s,m}$ in sämtlichen Fällen ein Weg in G ist.
- Das Wegintegral nach (B.21) ist zu berechnen.

B.2.1 Der Integrationsweg liegt in G :

Man unterscheidet zwei Fälle:

$d_{s,m}(\tau)$ ist reellwertig:

Probleme können nur dann auftreten, wenn $d_{s,m}(\tau) = \pm 1$ ist.

- für $s = 1$ ist die Sache unproblematisch, da für $d_{s,m}(\tau) = \pm 1$ nach Anhang B.1 das Integral gar nicht auftritt.
- für $s = 2$ gilt das Gleiche, da für $d_{s,m}(\tau) = \pm 1$ im Zähler ebenfalls ein Faktor $z - d_{s,m}(\tau)$ auftaucht.
der Spezialfall $\tau = 0$ wird auf später vertagt.

$d_{s,m}(\tau)$ ist komplexwertig:

- Da $d_{1,m}(\tau)$ in \mathcal{R} liegt, ist nur $s = 2$ zu betrachten.
- Da $d_{2,2}(\tau)$ einen negativen Imaginärteil hat, ist nur $d_{2,1}(\tau)$ zu betrachten.
- Angenommen es gibt ein $k \in [0, \frac{\pi}{a}]$ mit:

$$\Re[\gamma_{2,1}(k)] = 0 \quad \text{und} \quad \Im[\gamma_{2,1}(k)] \leq 0.$$

Das bedeutet:

$$\begin{aligned} \cos ka - \lambda = 0 & \Leftrightarrow \cos ka = \lambda \\ \sin ka - \sqrt{(1 - 2\tau^2) - \lambda^2} & \leq 0. \end{aligned}$$

Mit $\sin ka = \sqrt{1 - \lambda^2}$ würde das bedeuten, daß

$$\sqrt{1 - \lambda^2} \leq \sqrt{1 - \lambda^2 - 2\tau^2} \quad \text{gilt.}$$

Diese Ungleichung liefert nur für $\tau = 0$ keinen Widerspruch.

Zusammenfassend:

Der Integrationsweg $\gamma_{s,m}$ liegt in G .

Ausgenommen hiervon ist der Spezialfall $s = 2, \tau = 0$, der nochmals gesondert betrachtet wird.

B.2.2 Berechnung der Beträge und Argumente

Auch hier müssen zwei Fälle unterschieden werden:

$d_{s,m}(\tau)$ ist reellwertig:

Weil $a_{j,s,m}$ dann ebenfalls reellwertig ist, kann man sich auf die Betrachtung des Imaginärteils von (B.21) beschränken. Wegen der Festlegung des Argumentbereichs erhält man:

$$\Im \left[\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} \right] = \frac{\pi}{2} \left\{ -\operatorname{sgn}[-1 - d_{s,m}(\tau)] + \operatorname{sgn}[1 - d_{s,m}(\tau)] \right\}. \quad (\text{B.22})$$

$d_{s,m}(\tau)$ ist komplexwertig:

Hierbei kommen Real- und Imaginärteil von (B.21) zum Zuge:

$$\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} = \left[\ln | -1 - d_{s,m}(\tau) | - \ln | 1 - d_{s,m}(\tau) | \right] + i \left[\arg \{ -1 - d_{s,m}(\tau) \} - \arg \{ 1 - d_{s,m}(\tau) \} \right], \quad (\text{B.23})$$

$$\text{wobei} \quad \arg z = \arctan \left\{ \frac{\Re[z]}{\Im[z]} \right\} + \pi \theta(-\Re[z]) \quad \text{gilt.}$$

B.2.3 Ausführung der einzelnen Fälle

1. Fall: $s = 1$, $\tau^2 \neq 1$ und $s = 2$, $|\lambda| = |1 - \tau^2|$

$$\text{Mit (B.22) erkennt man:} \quad \Im \left[\int_{\gamma_{s,m}} dz \frac{1}{z} \right] = \begin{cases} \pi, & |\tau| < 1 \\ 0, & |\tau| > 1 \end{cases}. \quad (\text{B.24})$$

2. Fall: $s = 2$, $\lambda^2 = 1 - 2\tau^2$

$$\text{Hier gilt:} \quad \Im \left[\int_{\gamma_{2,1}} dz \frac{1}{z} \right] = \pi. \quad (\text{B.25})$$

3. Fall: $s = 2$, $\lambda^2 - (1 - 2\tau^2) > 0$

Jetzt ergibt sich:

$$\Im \left[\int_{\gamma_{2,1}} dz \frac{1}{z} \right] = \frac{\pi}{2} \left[\operatorname{sgn} \left(1 - \lambda + (-1)^m \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right) - \operatorname{sgn} \left(-1 - \lambda + (-1)^m \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} \right) \right].$$

Mit Hilfe von Fallunterscheidungen kann man zeigen, daß:

$$\begin{aligned} -1 - \lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} &< 0 \\ 1 - \lambda - \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} &\begin{cases} < 0 & \lambda > 1 - \tau^2 \\ > 0 & \lambda < 1 - \tau^2 \end{cases} \\ -1 - \lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} &\begin{cases} < 0 & \lambda > \tau^2 - 1 \\ > 0 & \lambda < \tau^2 - 1 \end{cases} \\ 1 - \lambda + \sqrt{\lambda^2 - (1 - 2\tau^2)} &> 0 \quad \text{gilt.} \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Das bedeutet:

$$\begin{aligned} \Im \left[\int_{\gamma_{2,1}} dz \frac{1}{z} \right] &= \begin{cases} 0 & \lambda > 1 - \tau^2 \\ \pi & \lambda < 1 - \tau^2 \end{cases} \\ \Im \left[\int_{\gamma_{2,2}} dz \frac{1}{z} \right] &= \begin{cases} \pi & \lambda > \tau^2 - 1 \\ 0 & \lambda < \tau^2 - 1 \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

4. Fall: $s = 2$, $\lambda^2 - (1 - 2\tau^2) < 0$

Nach (B.4) und (B.5) gilt: $a_{j,2,2}(\tau) = a_{j,2,1}^*(\tau)$ und $d_{2,2}(\tau) = d_{2,1}^*(\tau)$.

Aus (4.50) und (B.22) erhält man:

$$\begin{aligned} \Re \left[-i \int_{\gamma} dz \left(\frac{a_{j,2,1}(\tau)}{z - d_{2,1}(\tau)} + \frac{a_{j,2,2}(\tau)}{z - d_{2,2}(\tau)} \right) \right] = \\ \Re [a_{j,2,1}(\tau)] \left[\arg\{-1 - d_{2,1}(\tau)\} - \arg\{1 - d_{2,1}(\tau)\} \right. \\ \left. + \arg\{-1 - d_{2,2}(\tau)\} - \arg\{1 - d_{2,2}(\tau)\} \right] \\ + \Im [a_{j,2,1}(\tau)] \left[\ln|-1 - d_{2,1}(\tau)| - \ln|1 - d_{2,1}(\tau)| + \ln|-1 - d_{2,2}(\tau)| - \ln|1 - d_{2,2}(\tau)| \right]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Wegen} \quad \ln|z| &= \ln|z^*|, \\ \arg\{z^*\} &= -\arg\{z\}, \quad \text{falls } \Re[z] > 0, \\ \arg\{z^*\} &= 2\pi - \arg\{z\}, \quad \text{falls } \Re[z] < 0, \quad \Im[z] > 0, \\ \lambda^2 - 1 &< -2\tau^2 < 0 \quad \Rightarrow \quad |\lambda| < 1 \end{aligned}$$

gilt in diesem Fall:

$$\Re \left[-i \int_{\gamma} dz \left(\frac{a_{j,2,1}(\tau)}{z - d_{2,1}(\tau)} + \frac{a_{j,2,2}(\tau)}{z - d_{2,2}(\tau)} \right) \right] = 2\pi \Re [a_{j,2,1}(\tau)]. \quad (\text{B.28})$$

B.3 Der Spezialfall $\tau = 0$

Mit Hilfe von (4.25), (3.15), (3.34) und (4.34) errechnet man:

$$\begin{aligned} v_{j,l,1}(\tau) &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\frac{\pi}{a}}^0 dk \theta(j) 2i \sin kaj \theta(l) (-2i) \sin kal \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \theta(1-j) 2i e^{ika} \sin ka(j-1) \theta(1-l) (-2i) e^{-ika} \sin ka(l-1) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

$$= \theta(j) \theta(l) \delta_{jl} + \theta(1-j) \theta(1-l) \delta_{j-1, l-1} = \delta_{jl}, \quad \text{also}$$

$$\hat{V}_{a,1}(0) = \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \delta_{jl} |r_j\rangle \langle r_l| = \hat{I}_{\mathcal{E}} \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned} v_{j,l,2}(\tau) &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\frac{\pi}{a}}^0 dk \theta(j) 2i \sin kaj \theta(l) (-2i) \sin kal \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk \theta(-j) 2i \sin kaj \theta(-l) (-2i) \sin kal \right] = v_{j,l}^{(0)} = \theta(jl) \delta_{jl}. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Mit dem gebundenen Zustand $|r_0\rangle$ ergibt sich:

$$\hat{V}_{a,2}(0) + \hat{V}_{g,2}(0) = \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} [\theta(jl) \delta_{jl} |r_j\rangle \langle r_l|] + |r_0\rangle \langle r_0| = \hat{I}_{\mathcal{E}}, \quad (\text{B.32})$$

und somit ist in diesem Spezialfall die Vollständigkeit nachgewiesen.

Anhang C

Ergänzungen zur Stromberechnung

C.1 Berechnung der X-Matrizen

Hier soll beispielhaft gezeigt werden, wie man Gleichung (6.13) ableitet. Für die Gleichungen (6.14), (6.15) und (6.16) geht man analog vor.

Zunächst aber einige Definitionen:

- $\vec{M}_l(k, k'')$ ist die l -te Spalte der Matrix $\mathbf{M}(k, k'')$.
- $M_l^{(j)}$ ist ein Matrixelement der Matrix \mathbf{M} , und zwar das in der j -ten Reihe und in der l -ten Spalte.
- der Vektor $\tilde{\vec{M}}_l(k, k'')$ geht aus dem Vektor $\vec{M}_l(k, k'')$ durch Vertauschen von 1. und 2. sowie 3. und 4. Komponente hervor.

$$\tilde{\vec{M}}_l = \begin{pmatrix} M_l^{(2)} \\ M_l^{(1)} \\ M_l^{(4)} \\ M_l^{(3)} \end{pmatrix}, \quad \text{wobei} \quad \vec{M}_l = \begin{pmatrix} M_l^{(1)} \\ M_l^{(2)} \\ M_l^{(3)} \\ M_l^{(4)} \end{pmatrix} \quad \text{ist.} \quad (\text{C.1})$$

Als erstes wird das Integral aufgespalten und die Annahme $k > 0$ einbezogen.

$$\begin{aligned} I_s(k, k', t) &= \frac{1}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} e^{i(k-k'')a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \mathbf{M}_{3,s}(k'') \vec{\theta}(k, k'') \right\} \\ &\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \mathbf{M}_{4,s}(k', k'') \vec{\theta}(k', k'') \right\} \\ &= \frac{e^{ika(s-2)}}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \left(\int_{-\frac{\pi}{a}}^0 dk'' e^{iW(k'', t)} e^{-ik''a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \vec{M}_{3,s,2}(k'') \right\} \right. \\ &\quad \times \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \left[\theta(k') \vec{M}_{4,s,2}(k', k'') + \theta(-k') \vec{M}_{4,s,4}(k', k'') \right] \right\} \\ &\quad \left. + \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'', t)} e^{-ik''a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \vec{M}_{3,s,1}(k'') \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \left[\theta(k') \vec{M}_{4,s,1}(k', k'') + \theta(-k') \vec{M}_{4,s,3}(k', k'') \right] \right\} \right) \\ &= \frac{e^{ika(s-2)}}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} (I_1 + I_2). \quad (\text{C.2}) \end{aligned}$$

Im ersten Integral wird nun k'' durch $-k''$ substituiert.

$$I_1 = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(-k'',t)} e^{ik''a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, -k'', \epsilon_2) \vec{M}_{3,s,2}(-k'') \right\} \\ \times \left\{ \vec{S}^T(k', -k'', \epsilon_3) \left[\theta(k') \vec{M}_{4,s,2}(k', -k'') + \theta(-k') \vec{M}_{4,s,4}(k', -k'') \right] \right\}.$$

In den Skalarprodukten wird die Reihenfolge der Komponenten so vertauscht, daß ein Zusammenfassen mit I_2 möglich ist.

$$I_1 + I_2 = \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(-k'',t)} \\ \left(e^{ik''a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \vec{M}_{3,s,2}(-k'') \right\} \right. \\ \times \left. \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \left[\theta(k') \vec{M}_{4,s,2}(k', -k'') + \theta(-k') \vec{M}_{4,s,4}(k', -k'') \right] \right\} \right. \\ \left. + e^{-ik''a(s-2)} \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \vec{M}_{3,s,1}(k'') \right\} \right. \\ \left. \times \left\{ \vec{S}^T(k', k'', \epsilon_3) \left[\theta(k') \vec{M}_{4,s,1}(k', k'') + \theta(-k') \vec{M}_{4,s,3}(k', k'') \right] \right\} \right).$$

Das Produkt der Skalarprodukte wird in eine von links und rechts mit jeweils einem Vektor versehene Matrix verwandelt:

$$(\vec{S}_1^T \cdot \vec{M}_1)(\vec{S}_2^T \cdot \vec{M}_2) = \vec{S}_1^T \cdot \mathbf{M} \cdot \vec{S}_2, \quad \text{wobei} \\ X_l^{(j)} = M_1^{(j)} \cdot M_2^{(l)} \quad \text{ist.}$$

Nach dem Zusammenfassen ergibt sich dann:

$$I_s(k, k', t) = \frac{e^{ika(s-2)}}{N^2} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk'' e^{iW(k'',t)} \quad (C.3) \\ \times \left\{ \vec{S}^T(k, k'', \epsilon_2) \left[\theta(k') \mathbf{X}_{1,s}(k', k'') + \theta(-k') \mathbf{X}_{2,s}(k', k'') \right] \vec{S}(k', k'', \epsilon_3) \right\},$$

wobei

$$X_{1,s,l}^{(j)}(k', k'') = e^{ik''a(s-2)} \vec{M}_{3,s,2}^{(j)}(-k'') \vec{M}_{4,s,2}^{(l)}(k', -k'') \\ + e^{-ik''a(s-2)} M_{3,s,1}^{(j)}(k'') M_{4,s,1}^{(l)}(k', k'') \quad \text{und} \quad (C.4)$$

$$X_{2,s,l}^{(j)}(k', k'') = e^{ik''a(s-2)} \vec{M}_{3,s,2}^{(j)}(-k'') \vec{M}_{4,s,4}^{(l)}(k', -k'') \\ + e^{-ik''a(s-2)} M_{3,s,1}^{(j)}(k'') M_{4,s,3}^{(l)}(k', k''). \quad (C.5)$$

Analog erhält man in den anderen Fällen:

$$X_{3,s,l}^{(j)}(k'') = e^{ik''a(s-2)} \vec{M}_{3,s,2}^{(j)}(-k'') \vec{M}_{5,s,2}^{(l)}(-k'') \\ + e^{-ik''a(s-2)} M_{3,s,1}^{(j)}(k'') M_{5,s,1}^{(l)}(k''), \quad (C.6)$$

$$\vec{U}_1(k', k'') = \vec{M}_{4,2,2}(k', -k'') + \vec{M}_{4,2,1}(k', k'') \quad (C.7)$$

$$\vec{U}_2(k', k'') = \vec{M}_{4,2,4}(k', -k'') + \vec{M}_{4,2,3}(k', k'') \quad (C.8)$$

$$\vec{U}_3(k'') = \vec{M}_{5,2,2}(-k'') + \vec{M}_{5,2,1}(k''), \quad (C.9)$$

und durch Einsetzen von (6.6), (6.10) und (6.11) und mit Hilfe von (4.30) erhält man die Matrizen $\mathbf{X}_{n,s}$ und die Vektoren \vec{U}_n , $n = 1, 2, 3$, die in Abschnitt (6.2) dargestellt sind.

C.2 Residuensatz

C.2.1 Pole 1. Ordnung

Zu behandeln ist das Integral über den geschlossenen Weg ∂G_{\pm} mit dem Integranden gemäß (6.25):

$$R = \int_{\partial G_{\pm}} dk'' J(k'') = \int_{\partial G_{\pm}} dk'' g(e^{ik''a}) e^{ik''a} \cdot \prod_{j=1}^n \frac{1}{e^{ik''a} - z_j}.$$

Setzt man den in (4.40) definierten Weg γ auf ∂G_{\pm} fort, so gilt:

$$R = \frac{1}{ia} \int_{\partial G_{\pm}} dk'' g(\gamma(k'')) \gamma'(k'') \cdot \prod_{j=1}^n \frac{1}{\gamma(k'') - z_j}. \quad (\text{C.10})$$

Mit einer geeigneten Parametrisierung von ∂G_{\pm} erhält man:

$$R = \frac{1}{ia} \int_{u_a}^{u_e} du g(\gamma[\partial G_{\pm}(u)]) \gamma'(\partial G_{\pm}(u)) \cdot (\partial G_{\pm})'(u) \cdot \prod_{j=1}^n \frac{1}{\gamma(\partial G_{\pm}(u)) - z_j},$$

was durch den Weg $\nu_{\pm}(u) = \gamma(\partial G_{\pm}(u))$ übergeht in:

$$R = \frac{1}{ia} \int_{\nu_{\pm}} dz g(z) \prod_{j=1}^n \frac{1}{z - z_j} = \pm \frac{2\pi}{a} \sum_{z \in \gamma(G_{\pm})} \text{res}_z \left(g(\zeta) \prod_{j=1}^n \frac{1}{\zeta - z_j} \right). \quad (\text{C.11})$$

Treten keine Pole mit höherer Ordnung als eins auf, so gilt:

$$R = \pm N \sum_{z \in \gamma(G_{\pm})} \lim_{\zeta \rightarrow 0} (\zeta - z) \cdot g(\zeta) \prod_{j=1}^n \frac{1}{\zeta - z_j} = \pm N \sum_{z_l \in \gamma(G_{\pm})} g(z_l) \prod_{j=1, j \neq l}^n \frac{1}{z_l - z_j}, \quad (\text{C.12})$$

was wegen der Bijektivität von γ bedeutet, daß:

$$R = \pm N \sum_{k_l \in G_{\pm}} g(e^{ik_l a}) \prod_{j=1, j \neq l}^n \frac{1}{e^{ik_l a} - z_j} \quad \text{ist.} \quad (\text{C.13})$$

C.2.2 Pole in G_{\pm}

- Nach (6.22) liegt der Pol von $S(k + k'', \epsilon)$ nur dann in G_- , wenn k negativ ist. In G_+ kann kein Pol von $S(k + k'', \epsilon)$ liegen.
- Für $S(k - k'', \epsilon)$ tritt der umgekehrte Fall ein: In G_- liegt kein Pol von $S(k - k'', \epsilon)$. In G_+ liegt dann ein Pol, wenn k positiv ist.
- Existieren Pole von $B_2(k'')$, so liegen sie in der negativen imaginären Halbebene. Entsprechend liegen die Pole von $B_2(-k'')$ in der positiven imaginären Halbebene.

C.3 Strom für Blochzustände

Gegenstand der Betrachtungen sind Berechnungen von $I_s^{(S)}(k, k', t)$ gemäß Formel (6.13). Mit (6.26) und der Aufspaltung in vier Anteile nach (6.37) erhält man:

$$\begin{aligned}
I_s^{(S)}(k, k', t) = & \frac{e^{ika(s-2)}}{N} \lim_{\epsilon_2, \epsilon_3 \rightarrow 0} \left(\theta(k') B_s(k') C_s \left(k - i \frac{\epsilon_2}{a}, t \right) \frac{1}{e^{ika} e^{\epsilon_2} - e^{-ik'a} e^{\epsilon_3}} \right. \\
& + \theta(-k') \left\{ \left[C_s \left(k - i \frac{\epsilon_2}{a}, t \right) \frac{1}{e^{ika} e^{\epsilon_2} - e^{-ik'a} e^{\epsilon_3}} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + C_s \left(-k' - i \frac{\epsilon_3}{a}, t \right) \frac{1}{e^{-ik'a} e^{\epsilon_3} - e^{ika} e^{\epsilon_2}} \right] \right. \\
& \quad \left. + A_{s,R}(k') C_s \left(k - i \frac{\epsilon_2}{a}, t \right) \frac{1}{e^{ika} e^{\epsilon_2} - e^{ik'a} e^{\epsilon_3}} \right. \\
& \quad \left. - C_s \left(-k' - i \frac{\epsilon_3}{a}, t \right) \frac{1}{e^{-ik'a} e^{\epsilon_3} - e^{-ika} e^{\epsilon_2}} \right\} \Bigg). \quad (C.14)
\end{aligned}$$

Um im weiteren eindeutig vorgehen zu können, muß einer der Grenzwerte berechnet werden. In unserem Fall lassen wir der Einfachheit halber ϵ_3 gegen Null gehen. Desweiteren werden die vorkommenden Brüche in Komponenten von \vec{S} überführt und es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
I_s^{(S)}(k, k', t) = & \frac{e^{ika(s-2)}}{N} \lim_{\epsilon_2 \rightarrow 0} \left\{ \vec{S}^T(k, k', \epsilon_2) \left[\theta(k') \vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) + \theta(-k') \vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) \right] \right\} \\
\text{mit} \\
\vec{U}_5(k, k', t, \epsilon_2) = & e^{ik'a} B_s(k') C_s(k_2, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad k_2 = k - i \frac{\epsilon_2}{a}, \quad (C.15) \\
\vec{U}_6(k, k', t, \epsilon_2) = & \begin{pmatrix} 0 \\ e^{ik'a} C_s(-k', t) \\ e^{-ik'a} A_{s,R}(k') C_s(k_2, t) \\ e^{ik'a} [C_s(k_2, t) - C_s(-k', t)] \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

C.4 Abschätzungen

C.4.1 Das Integral $I(t)$

Die Rechenregeln der komplexen Analysis liefern:

$$\begin{aligned}
e^{\mp i W(\Upsilon_{\pm}(u), t)} &= \exp \left\{ \mp i \frac{2Vt}{\hbar} \cos \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u \pm i \sin u) \right] \right\} \\
&= \exp \left\{ \mp i \frac{2Vt}{\hbar} \left(\cos \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] \cosh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \mp i \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] \right) \right\}, \quad \text{also} \\
|e^{\mp i W(\Upsilon_{\pm}(u), t)}| &= \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar} \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] \right\}. \quad (C.16)
\end{aligned}$$

Da $\sin(\pi - u) = \sin u$,

$$\sin \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] = \sin \left[-\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) + \pi \right] = \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 - \cos u) \right] \quad \text{und}$$

$$\sin \left[\frac{\pi}{2} \{1 + \cos(\pi - u)\} \right] = \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 - \cos u) \right] \quad \text{sind, gilt:}$$

$$\begin{aligned}
I(t) &= \int_0^\pi du |e^{\mp i W(\Upsilon_\pm(u), t)}| \\
&= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} du \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar} \sin \left[\frac{\pi}{2} (1 - \cos u) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{C.17}$$

Mit der Abschätzung der Sinus- und Hyperbelsinusfunktion:

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq 2u/\pi \leq \sin u \leq u \\ 0 \leq u \leq \sinh u \leq 2u/\pi \sinh(\pi/2) \end{array} \right\} \quad \text{für} \quad 0 \leq u \leq \frac{\pi}{2}, \tag{C.18}$$

der Integration “über” die Abschätzung:

$$\begin{aligned}
0 &\leq \int_0^u du' \frac{2}{\pi} u' \leq \int_0^u du' \sin u' \leq \int_0^u du' u' \\
\Leftrightarrow \quad 0 &\leq \frac{1}{\pi} u^2 \leq 1 - \cos u \leq \frac{1}{2} u^2 \quad \text{für} \quad -\frac{\pi}{2} \leq u \leq \frac{\pi}{2}
\end{aligned} \tag{C.19}$$

$$\text{oder alternativ} \quad 1 - \cos u \leq \frac{2}{\pi} u \quad \text{für} \quad 0 \leq u \leq \frac{\pi}{2}$$

und der Monotonie der Exponential-, Hyperbelsinus- (steigend) und Kosinusfunktion (fallend) auf dem betrachteten Intervall gelangt man zur folgenden Abschätzung:

$$\begin{aligned}
\sin \left[\frac{\pi}{2} (1 - \cos u) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right] &\geq \sin \left(\frac{1}{2} u^2 \right) \sinh u \geq \frac{2}{\pi} \frac{1}{2} u^2 \cdot u = \frac{1}{\pi} u^3, \quad \text{also} \\
|e^{\mp i W(\Upsilon_\pm(u), t)}| &\leq \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar \pi} u^3 \right\} \quad \text{für} \quad 0 \leq u \leq \frac{\pi}{2}.
\end{aligned} \tag{C.20}$$

Mit Hilfe der Substitution $u' := u^3$ errechnet man:

$$I(t) \leq 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} du \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar \pi} u^3 \right\} = 2 \int_0^{\left(\frac{\pi}{2}\right)^3} du' \frac{1}{3} (u')^{-\frac{2}{3}} \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar \pi} u' \right\}.$$

Da der Integrand für positive u positiv ist, kann das Integral durch Vergrößern der oberen Grenze nach oben abgeschätzt und mit Hilfe der Gammafunktion Γ eine obere Grenze berechnet werden [9]:

$$I(t) < \frac{2}{3} \int_0^\infty du' (u')^{-\frac{2}{3}} \exp \left\{ -\frac{2Vt}{\hbar \pi} u' \right\} = \frac{2}{3} \Gamma \left(\frac{1}{3} \right) \cdot \left(\frac{\hbar \pi}{2Vt} \right)^{\frac{1}{3}}. \tag{C.21}$$

C.4.2 Der Quotient Q

Betrachtet man Q auf dem Weg Υ_\pm nach (6.21), so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
Q(\Upsilon_\pm(u)) &= \frac{|\sin(\Upsilon_\pm(u)a)|}{|e^{\pm i ka} - e^{\mp i \Upsilon_\pm(u)a}|} \\
&= \sqrt{\frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) \right] + \sinh^2 \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right]}{(\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1)^2 + 2 \exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} (1 - \cos \left[\frac{\pi}{2} (1 + \cos u) - ka \right])}}, \\
u &\in [0, \pi], \quad 0 < |k| < \frac{\pi}{a}.
\end{aligned} \tag{C.22}$$

Man schätzt Q nach oben ab, indem man den zweiten Summanden des Nenners wegläßt. Der verbleibende Ausdruck ist symmetrisch in u bzgl. $\frac{\pi}{2}$, so daß u auf das Intervall $[0, \frac{\pi}{2}]$ eingeschränkt werden kann.

Mit $(e^w - 1) > w$ für positive w , (C.18) und (C.19) erhält man:

$$\begin{aligned} Q^2(\Upsilon_{\pm}(u)) &< \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{2}(1 - \cos u) \right] + \sinh^2 \left[\frac{\pi}{2} \sin u \right]}{\left(\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1 \right)^2} \\ &< \frac{\sin^2 u + \left[\left(\sinh \frac{\pi}{2} \right) (\sin u) \right]^2}{\left(\frac{\pi}{2} \sin u \right)^2} < \frac{\left[1 + \sinh^2 \left(\frac{\pi}{2} \right) \right] u^2}{u^2} < 7. \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

C.4.3 Der Nenner von Q

Nach (C.22) soll nun

$$N_Q = \sqrt{\left(\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1 \right)^2 + 2 \exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} \left(1 - \cos \left[\frac{\pi}{2}(1 + \cos u) - ka \right] \right)} \quad (\text{C.24})$$

nach unten abgeschätzt werden.

- Für $0 < ka < \frac{\pi}{2}$ wird der 2. Summand unter der Wurzel klein, wenn $\frac{\pi}{2} < u < \pi$ ist. In diesem Fall substituiert man $u = \pi - v$ und benennt v wieder in u um.
- Für $\frac{\pi}{2} < ka < \pi$ wird der 2. Summand klein, wenn $0 < u < \frac{\pi}{2}$.

Nun muß folgendes untersucht werden:

$$\begin{aligned} N_Q^2 &= \left(\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1 \right)^2 + 2 \exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} \left(1 - \cos \left[\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn} \eta \cos u - \eta \right] \right), \quad \text{mit} \\ \eta &= \left(ka - \frac{\pi}{2} \right). \end{aligned}$$

Der Betrag des Arguments des Kosinustermes ist kleiner als $\frac{\pi}{2}$, also kann Abschätzung (C.19) angewandt werden und man erhält:

$$N_Q^2 \geq \left(\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1 \right)^2 + \frac{2}{\pi} \exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} \left[\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn} \eta \cos u - \eta \right]^2.$$

Im 1. Summand wird die Exponentialfunktion durch:

$$\exp \left\{ \frac{\pi}{2} \sin u \right\} - 1 \geq \exp \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sin u \right\} - 1 > \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sin u,$$

im 2. Summand durch 1 nach unten abgeschätzt. Deshalb gilt:

$$\begin{aligned} N_Q^2 &> \frac{\pi}{2}(1 - \cos^2 u) + \frac{2}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} \cos u - |\eta| \right]^2 = \frac{2}{\pi} \left(|\eta| - \frac{\pi}{2} \right)^2 + 2|\eta|(1 - \cos u) \\ &> \frac{2}{\pi} \left(|\eta| - \frac{\pi}{2} \right)^2, \quad \text{also} \\ N_Q &> \sqrt{\frac{2}{\pi}} P(k), \quad \text{wobei} \quad P(k) = \begin{cases} ka & 0 < ka < \frac{\pi}{2} \\ \pi - ka & \frac{\pi}{2} < ka < \pi \end{cases} \quad \text{ist.} \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Literaturverzeichnis

- [1] P. L. McEuen, E. B. Foxman, U. Meirav, M. A. Kastner, Y. Meir, N. S. Windgreen, S. J. Wind.
Transport Spectroscopy of a Coulomb Island in the Quantum Hall Regime.
Phys. Rev. Lett. Vol. **66**, No. 14, p. 1926 (1991).
- [2] Y. Meir, N. S. Wingreen, P. A. Lee.
Transport through a Strongly Interacting Electron System: Theory of Periodic Conductance Oscillations.
Phys. Rev. Lett. Vol. **66**, No. 23, p. 3048 (1991).
- [3] S. Hershfield, J. H. Davies, J. W. Wilkins.
Probing the Kondo Resonance by Resonant Tunneling through an Anderson Impurity.
Phys. Rev. Lett. Vol. **67**, No. 26, p. 3720 (1991).
- [4] T. K. Ng, P. A. Lee.
On-Site Coulomb Repulsion and Resonant Tunneling.
Phys. Rev. Lett. Vol. **61**, No. 15, p. 1768 (1988).
- [5] E. N. Economou.
Green's Functions in Quantum Physics.
Springer Verlag.
- [6] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin.
Solid State Physics.
Saunders College.
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, Franck Laloe.
Quantum Mechanics Vol. 1,2.
Wiley Interscience.
- [8] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands.
Feynman Vorlesungen über Physik, Band 3: Quantenmechanik.
Oldenbourg.
- [9] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew.
Taschenbuch der Mathematik.
Teubner.
- [10] W. Fischer, I. Lieb.
Funktionentheorie.
F. Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden.
- [11] H. Heuser.
Lehrbuch der Analysis, Band 1,2.
Teubner Verlag.

- [12] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas.
Generalized many-channel conductance formula with application to small rings.
Phys. Rev. B, Vol. **31**, No. 10, p. 6207 (1985).
- [13] J. L. Beeby, (Hrsg.).
Condensed Systems of Low Dimensionality.
Plenum Press, New York.
- [14] G. Grinstein, G. Mazenko, (Hrsg.).
Directions in Condensed Matter Physics.
World Scientific.
- [15] M. Naito, M. R. Beasley.
Microscopic study of tunneling processes via localized states in amorphous $-Si/SiO_x$ tunnel barriers.
Phys. Rev. B, Vol. **35**, No. 5, p. 2548 (1987).

Danksagung

Ich danke Prof. Dr. A. Schmid für die interessante Aufgabenstellung und die geduldige Betreuung dieser Arbeit. Dank gilt auch Prof. Dr. G. Schön für die Übernahme des Korreferats.

Für die Hilfe bei der Auseinandersetzung mit dem Medium "Computer" möchte ich mich bei Thomas Strohm und bei Martin Weindel bedanken.

Ein besonderer Dank gilt Christian Fuchs für unzählige interessante Gespräche und Diskussionen und für die mühsame Arbeit des Korrekturlesens.

Hiermit versichere ich, daß ich diese Arbeit ohne fremde Hilfe verfaßt habe. Es wurden ausschließlich die erlaubten Hilfsmittel und die im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen verwendet.