

Die dynamische Leitfähigkeit ungeordneter Elektronensysteme im Instantonbild

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN
der Fakultät für Physik der Universität (TH)
Karlsruhe

genehmigte

DISSERTATION

von
Dipl.-Phys. Martin Töx
aus Lörrach / Baden

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Juni 2000
Hauptreferent: Prof. Dr. P. Wölfle
Korreferent: Prof. Dr. R. v. Baltz

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Die Zustandsdichte	5
1.1 Gaußsche Unordnung	5
1.2 Die Zustandsdichte	6
1.3 Die Variationsmethode	7
1.4 Die Sattelpunktsfluktuationen	10
1.5 Unordnung mit endlicher Korrelationslänge	16
1.5.1 Die Sattelpunktswirkung	16
1.5.2 Die quadratischen Fluktuationen	17
2 Die dynamische Leitfähigkeit	20
2.1 Die Mott-Formel	20
2.2 Der Zwei-Instanton-Sattelpunkt	21
2.2.1 Herleitung der Sattelpunktgleichungen	21
2.2.2 Ansatz zur Lösung der Sattelpunktgleichungen	22
2.2.3 Die Sattelpunktswirkung	25
2.2.4 Der eindimensionale Fall	27
2.3 Der Beitrag der quadratischen Fluktuationen	29
2.3.1 Die Berechnung der Determinante	31
2.3.2 Die Nullmoden von \mathcal{M}	34
2.3.3 Die übrigen Eigenwerte von \mathcal{M}	36
2.3.4 Translationen und Rotationen	38
2.3.5 Die Nahezu-Nullmode	38
2.4 Resultate	39
3 Der hydrodynamische Limes	41
3.1 Entartete Störungstheorie	41

3.2	Der Bereich kleiner Winkelfluktuationen ($\cos 2\theta_0 \gg g^{1/2}D^s$)	43
3.3	Der Bereich starker Winkelfluktuationen	44
4	Zusammenfassung	46
	Anhang	48
A	Die quadratischen Fluktuationen: Äquivalenz zur Supersymmetrie	48
A.1	Weißes Rauschen	48
A.2	Endliche Korrelationslänge	50
A.3	Der Übergang zum weißen Rauschen	52
B	Zur Berechnung der Fluktuationsdeterminanten	53
B.1	Weißes Rauschen in drei Dimensionen	53
B.2	Asymptotisches Verhalten für verschwindende Korrelationslänge in drei Dimensionen	54
B.3	Berechnung der Determinanten bei Brezin/Parisi	55
C	Eigenschaften der Instantonlösung	56
D	Integration längs eines Tales	58
D.1	Variationsmethode	58
D.2	Supersymmetrie	59
	Literatur	60

Einleitung

In jedem realen Metall finden sich zahlreiche Defekte, wie Fremdatome oder Gitterfehlstellen, an denen die Elektronen streuen. Ist diese Unordnung stark genug, hat sie einen dramatischen Effekt auf die Wellenfunktionen der Elektronen: sie werden lokalisiert und fallen für große Abstände zu allen Seiten exponentiell ab. Obwohl die Teilchen durch Potentialbarrieren tunneln können, verhindern Interferenzeffekte ihre Ausbreitung. Das Verhalten von Elektronen in einem Unordnungspotential ist auch 40 Jahre nach der grundlegenden Arbeit von Anderson [35] zur Lokalisierung nicht völlig geklärt.

Nach wichtigen Vorarbeiten von Thouless [36] stellten 1979 Abrahams, Anderson, Licciardello und Ramakrishnan die Ein-Parameter-Skalentheorie [37] auf. Sie besagt, daß es in ein und zwei Dimensionen (ohne Magnetfeld) keinen metallischen Zustand gibt und beschreibt in drei Dimensionen den Metall-Isolator-Übergang, was auch durch zahlreiche numerische Untersuchungen und Experimente bestätigt wird [34]. Die Entdeckung einer scheinbar metallischen Phase in zwei Dimensionen [38] gibt Anlaß zu der Vermutung, daß Wechselwirkung eine metallische Phase stabilisiert. Die Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalenhypothese ist bis heute ein Diskussionsgegenstand, siehe z. B. [39].

Wir beschäftigen uns in dieser Arbeit mit nichtwechselwirkenden Elektronen im tief lokalisierten Regime. Zur systematischen Berechnung von Ein- und Zwei-Teilchen Green-Funktionen im Instantonbild geht man von “typischen” Konfigurationen der Unordnung mit tief lokalisierten Zuständen aus; dem entspricht quantitativ die Sattelpunktsentwicklung eines Pfadintegrals über das Zufallspotential.

Im ersten Kapitel erläutern wir detailliert die Variationsmethode oder Metho-

de der “optimalen Fluktuation” anhand der Berechnung der Zustandsdichte im Lifshitz-tail für Gaußsche Unordnung. Dabei wird auch der Fall einer beliebigen Korrelationsfunktion des Unordnungspotentials behandelt.

Anschließend berechnen wir die frequenzabhängige Leitfähigkeit in diesem Regime und können die Physik der Resonanztunnel-Beiträge zur Leitfähigkeit, die zuerst von Mott vorgeschlagen wurde [22], quantitativ bestätigen. Für Dimensionen größer als eins sind die Resultate bereits in der umfangreichen Arbeit von Houghton, Schäfer und Wegner [7] zu finden, deren Vorgehensweise wir aber, bis auf einen Bereich exponentiell kleiner Frequenzen, deutlich vereinfachen können. Wir erweitern die eindimensionale, supersymmetrische Rechnung von Hayn und John [6] auf Dimensionen größer als eins. Im eindimensionalen Fall zeigen wir den Fehler in [7] auf, der zum Widerspruch mit den Resultaten von [6] führt. Im dritten Kapitel behandeln wir den “hydrodynamischen Limes” kleiner Frequenzen. Anhänge A und B beziehen sich auf die Berechnung der quadratischen Sattelpunktsfluktuationen. In Anhang C fassen wir einige Eigenschaften der Instantonlösung zusammen, schließlich erläutern wir in Anhang D die “Valley-Methode”.

Kapitel 1

Die Zustandsdichte

Wir berechnen die Zustandsdichte freier Elektronen in einem Zufallspotential $V(\mathbf{x})$ in d Dimensionen ($d=1, 2$ oder 3) im tief lokalisierten Bereich, d.h. für große negative Energien. In diesem Bereich sind die Elektronen in großen, seltenen Fluktuationen des Potentials gebunden und die Zustandsdichte ist exponentiell klein, man spricht vom Lifshitz-tail oder Lifshitz-Ausläufer [15].

1.1 Gaußsche Unordnung

Wir verwenden Gaußsche Unordnung mit einer (kurzreichweitigen) Korrelationsfunktion

$$\langle V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \rangle = W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') , \quad (1.1)$$

der Mittelwert des Potentials liege bei Null. Für die konkreten Rechnungen nehmen wir zur Vereinfachung weißes Rauschen an, d.h. das Potential sei räumlich völlig unkorreliert,

$$\langle V(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}') \rangle = \gamma \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (1.2)$$

Diese Näherung bedeutet, daß die Lokalisierungslänge der gebundenen Zustände deutlich größer als die Korrelationslänge der Unordnung sein soll (siehe auch Kapitel 1.5). Die Wahrscheinlichkeitsdichte für eine bestimmte Realisierung $V(\mathbf{x})$ ist dann gegeben durch das Gewicht

$$P[V] = \exp \left[-\frac{1}{2} \int d^d x d^d x' V(\mathbf{x}) W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}') \right] , \quad (1.3)$$

wobei W^{-1} als Matrix-Inverse von W in \mathbf{x}, \mathbf{x}' zu verstehen ist,

$$\int d^d x' W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \quad (1.4)$$

bzw. für weißes Rauschen:

$$P[V] = \exp \left[-\frac{1}{2\gamma} \int d^d x V^2(\mathbf{x}) \right]. \quad (1.5)$$

$\langle \dots \rangle$ bedeutet die Unordnungsmittelung

$$\langle \dots \rangle \equiv \int \mathcal{D}V P[V] \dots \quad \text{mit} \quad \langle 1 \rangle = 1, \quad (1.6)$$

den unendlichen Normierungsfaktor stecken wir also in das Integrationsmaß $\mathcal{D}V$.

1.2 Die Zustandsdichte

Für gegebenes Potential $V(\mathbf{x})$ gehen wir aus von der stationären Schrödingergleichung (wir verwenden $\hbar = 2m = 1$)

$$(-\nabla^2 + V)\psi_n = E_n \psi_n, \quad (1.7)$$

$n = 0, 1, \dots$. Das Problem besteht nun darin, die über die Unordnung gemittelte Zustandsdichte zu berechnen (Vol ist das makroskopische Volumen des Systems):

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{1}{\text{Vol}} \left\langle \sum_n \delta(E - E_n[V]) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\text{Vol}} \int \mathcal{D}V \exp \left[-\frac{1}{2\gamma} \int d^d x V^2(\mathbf{x}) \right] \sum_n \delta(E - E_n[V]). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Man kann die Zustandsdichte auch als Imaginärteil der unordnungsgemittelten 1-Teilchen Green-Funktion ausdrücken,

$$n(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int \mathcal{D}V P[V] \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - i0^+ - H(V)} \right| \mathbf{x} \right\rangle, \quad (1.9)$$

und dies als Pfadintegral über zusätzlich eingeführte Felder schreiben, welches dann mit der Supersymmetrie- oder der Replika-Methode ausgewertet

wird [33], [20], [9]. In diesem Kapitel werden wir stattdessen direkt das Funktionalintegral (1.8) auswerten [8]. Diese Methode hat neben der Vermeidung gewisser — zumindest bei der Berechnung von 2-Teilchen Green-Funktionen — problematischer analytischer Fortsetzungen den Vorteil, daß die Sattelpunkte unmittelbar physikalisch interpretierbar sind als wahrscheinlichste oder “optimale” Realisierungen des Zufallspotentials unter den gegebenen Nebenbedingungen.

1.3 Die Variationsmethode

Nur Potentiale, die einen gebundenen Zustand bei der vorgegebenen Energie $E < 0$ besitzen, liefern einen Beitrag zum Funktionalintegral (1.8). Die Variationsmethode von Houghton und Schäfer [8] ist eine Sattelpunktsentwicklung des Funktionalintegrals im Raum derjenigen Funktionen $V(\mathbf{x})$, welche diese Nebenbedingung erfüllen.

Der Hauptbeitrag stammt von den Potentialen mit maximalem Gewicht $P[V]$ bzw. minimaler “Wirkung” $\int d^d x V^2(\mathbf{x})$. Wegen der Translationsinvarianz von (1.5) gibt es mit einer Lösung des Variationsproblems gleich eine ganze Schar von Sattelpunkten, parametrisiert durch eine Schwerpunktskoordinate, die wir zunächst Null setzen. Da wir das absolute Minimum von $\int d^d x V^2(\mathbf{x})$ suchen, können wir annehmen, daß der gebundene Zustand bei E der Grundzustand des Potentials ist, $E = E_0$.

Die Sattelpunktgleichung

Die Variationsgleichung für einen Sattelpunkt lautet (ρ ist ein Lagrange-Multiplikator)

$$V(\mathbf{x}) + \rho \frac{\delta}{\delta V(\mathbf{x})} (E_0[V] - E) = 0 . \quad (1.10)$$

Wir berechnen die Variation der Grundzustandsenergie $E_0[V]$ in gewöhnlicher Störungstheorie:

$$\begin{aligned} \delta E_0 &= E_0[V + \delta V] - E_0[V] \\ &= \langle \psi_0 | \delta V | \psi_0 \rangle - \sum_{k \neq 0} \frac{\langle \psi_0 | \delta V | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \delta V | \psi_0 \rangle}{E_k - E_0} + O(\delta V^3) , \end{aligned} \quad (1.11)$$

d.h.

$$\frac{\delta E_0}{\delta V(\mathbf{x})} = \psi_0^2(\mathbf{x}) , \quad (1.12)$$

wobei ψ_0 die (reelle und normierte) Grundzustands-Wellenfunktion ist.^{1 2}

Das Sattelpunktpotential $V = V_{Sp}$ genügt also der Bedingung

$$V_{Sp}(\mathbf{x}) = -\rho \psi_0^2(\mathbf{x}) . \quad (1.13)$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung für ψ_0 erhält man die nichtlineare Differentialgleichung

$$\left(-\Delta - \rho \psi_0^2(\mathbf{x}) \right) \psi_0(\mathbf{x}) = -|E| \psi_0(\mathbf{x}) . \quad (1.14)$$

Mit Hilfe der Reskalierung

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \left(\frac{|E|}{\rho} \right)^{1/2} \varphi_0(\tilde{\mathbf{x}}) , \quad (1.15)$$

$$\tilde{\mathbf{x}} = |E|^{1/2} \mathbf{x} \equiv \mathbf{x} / \xi \quad (1.16)$$

bringen wir diese Gleichung auf die dimensionslose Form

$$\left(-\Delta + 1 - \varphi_0^2(\mathbf{x}) \right) \varphi_0(\mathbf{x}) = 0 . \quad (1.17)$$

Die Variable $\tilde{\mathbf{x}}$ haben wir in (1.17) wieder \mathbf{x} genannt. Wir messen also in (1.17) Längen in Einheiten der Längenskala³ $\xi = |E|^{-1/2}$ und Energien in Einheiten der Bindungsenergie $|E|$.

Gl. (1.17), die sogenannte *Instantongleichung*, besitzt für Dimensionen $d < 4$ lokalisierte Lösungen mit endlicher Wirkung.⁴ Die Lösung mit minimaler "Wirkung" $S_0 = \int d^d x V^2 = \int d^d x \varphi_0^4$ (siehe (1.24)) ist kugelsymmetrisch und monoton fallend [1],[21]. Nur im eindimensionalen Fall kann man die Lösung analytisch angeben:

$$\varphi_0(x) = \sqrt{2} / \cosh(x) ;$$

¹Wir wählen im folgenden alle Eigenfunktionen ψ_n reell.

²Den zweiten Term der Entwicklung (1.11) benötigen wir erst im nächsten Kapitel.

³Das ist in führender Ordnung die gemittelte Lokalisierungslänge.

⁴siehe z.B. die ausführlichen Darstellungen [16],[18]. Der Name Instanton stammt aus der euklidischen Feldtheorie und bezieht sich auf die Lokalisierung in der (euklidischen) Zeit.

für Dimensionen $d > 1$ muß $\varphi_0(r)$ numerisch bestimmt werden, siehe Anhang C. Man beachte, daß die Norm von φ_0 ,

$$\|\varphi_0\| = \left[\int d^d x \varphi_0^2(\mathbf{x}) \right]^{1/2}, \quad (1.18)$$

durch die Form der nichtlinearen Gleichung (1.17) festgelegt ist. Da ψ_0 auf eins normiert ist, folgt aus (1.15) für den Lagrangeparameter

$$\rho = |E|^{1-d/2} \|\varphi_0\|^2. \quad (1.19)$$

Für große Abstände ergibt sich aus (1.17) das asymptotische Verhalten

$$\varphi_0(r) \propto r^{-\frac{d-1}{2}} e^{-r}. \quad (1.20)$$

Einsetzen des Sattelpunktpotentials (1.13), (1.15)

$$V_{Sp}(\mathbf{x}) = -|E| \varphi_0^2(\tilde{\mathbf{x}}) \equiv |E| \tilde{V}_{Sp}(\tilde{\mathbf{x}}) \quad (1.21)$$

in das Funktionalintegral (1.8) liefert für die Zustandsdichte den ‘‘Sattelpunktsbeitrag’’

$$n(E) \propto \exp \left[-\frac{1}{2\gamma} \int d^d x V_{Sp}^2(\mathbf{x}) \right] = \exp \left[-\frac{1}{g} S_0 \right], \quad (1.22)$$

mit

$$\frac{1}{g} \equiv \frac{|E|^{2-d/2}}{2\gamma}, \quad (1.23)$$

$$S_0 = \int d^d x \varphi_0^4(\mathbf{x}). \quad (1.24)$$

S_0 , die Sattelpunktwirkung, ist eine numerische Konstante, sie hängt mit der Norm von φ_0 zusammen über $S_0 = \frac{4}{4-d} \|\varphi_0\|^2$, siehe (C.7). Für $d=1$ ist $S_0 = 16/3$; die Zahlenwerte für $d=2$ und $d=3$ lauten (siehe (C.11): $S_0 = 23.402$ bzw. 75.589 . S_0 und auch $\varphi_0(0)$ divergieren für $d \rightarrow 4$.

Der dimensionslose Parameter g (die ‘‘Kopplungskonstante’’) kontrolliert die Sattelpunktsnäherung: Die Näherung wird exakt im Limes $g \rightarrow 0$ ($|E| \rightarrow \infty$ bei festem γ oder $\gamma \rightarrow 0$ bei fester Energie), d.h. falls die Zustände im Vergleich zu den typischen Fluktuationen des Potentials tief gebunden sind; dies entspricht der exponentiell kleinen Zustandsdichte (1.22).

1.4 Die Sattelpunktsfluktuationen

Um den Vorfaktor der Zustandsdichte zu bestimmen, müssen wir den Beitrag der quadratischen Fluktuationen um den Sattelpunkt berücksichtigen, d.h.

$$n(E) = \frac{1}{\text{Vol}} \int \mathcal{D}(\delta V) \exp \left[-\frac{1}{2\gamma} \int d^d x (V_{Sp} + \delta V)^2 \right] \delta(E - E_0[V_{Sp} + \delta V]) . \quad (1.25)$$

Wir entwickeln die Abweichung von V_{Sp} in einer Orthonormalbasis $\{V_i\}$ im Raum der quadrat-integrierbaren Funktionen,

$$\delta V(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i V_i(\mathbf{x}) \quad , \quad \int d^d x V_i(\mathbf{x}) V_j(\mathbf{x}) = \delta_{i,j} , \quad (1.26)$$

das Integrationsmaß ist

$$\mathcal{D}(\delta V) = \prod_i \frac{da_i}{\sqrt{2\pi\gamma}} . \quad (1.27)$$

Wir wählen

$$V_0(\mathbf{x}) = \psi_0^2(\mathbf{x}) / \|\psi_0^2\| , \quad (1.28)$$

also V_0 proportional zu V_{Sp} . In erster Ordnung Störungstheorie (1.11) bedeutet die Nebenbedingung $\delta E_0 = 0$, daß nur Fluktuationen orthogonal zu V_0 erlaubt sind, d.h. $a_0 = 0$. Die Forderung, daß $\int d^d x V^2$ unter diesen Fluktuationen stationär ist — $\int d^d x V \delta V = 0$ für alle δV mit $\langle \psi_0 | \delta V | \psi_0 \rangle = \int d^d x \psi_0^2 \delta V = 0$ — lieferte uns gerade die Sattelpunktsbedingung (1.13) $V_{Sp} \propto \psi_0^2$.

Berücksichtigt man nun auch die zweite Ordnung Störungstheorie, so definiert die Nebenbedingung eine gekrümmte Hyperfläche im Funktionenraum, die wir in einer Umgebung des Sattelpunktes mit $\{a_i\}, i > 0$, parametrisieren: a_0 ist dann eine Funktion der a_i , wobei die ersten Ableitungen an der Stelle $a_i = 0, i = 1, 2, \dots$, verschwinden.

Wir transformieren zunächst wieder auf dimensionslose Einheiten, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/\xi = |E|^{1/2} \mathbf{x}$, siehe (1.16),

$$V_i(\mathbf{x}) = |E|^{d/4} \tilde{V}_i(\tilde{\mathbf{x}}) , \quad (1.29)$$

$$\psi_i(\mathbf{x}) = |E|^{d/4} \phi_i(\tilde{\mathbf{x}}) , \quad (1.30)$$

wobei der Vorfaktor für die richtige Normierung der \tilde{V}_i und ϕ_i sorgt, d.h.

$$\int d^d \tilde{x} \tilde{V}_i(\tilde{\mathbf{x}}) \tilde{V}_j(\tilde{\mathbf{x}}) = \delta_{i,j} = \int d^d \tilde{x} \phi_i(\tilde{\mathbf{x}}) \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}) . \quad (1.31)$$

Die Schrödingergleichung (1.7) lautet nun für die ϕ_i

$$(-\Delta - \varphi_0^2) \phi_i = \tilde{E}_i \phi_i \quad , \quad \tilde{E}_i \equiv E_i/|E| . \quad (1.32)$$

Man beachte

$$\phi_0(\mathbf{x}) = \frac{\varphi_0(\mathbf{x})}{\|\varphi_0\|} \quad , \quad \tilde{V}_0(\mathbf{x}) = \frac{\varphi_0^2(\mathbf{x})}{\|\varphi_0^2\|} . \quad (1.33)$$

Wir setzen ferner

$$\delta V(\mathbf{x}) = |E| \sum_i \tilde{a}_i \tilde{V}_i(\tilde{\mathbf{x}}) , \quad (1.34)$$

$$a_i = |E|^{1-d/4} \tilde{a}_i \quad , \quad \frac{da_i}{\sqrt{2\pi\gamma}} = \frac{d\tilde{a}_i}{\sqrt{\pi g}} . \quad (1.35)$$

Die Störungstheorie (1.11) liefert dann die dimensionslose Gleichung

$$0 \stackrel{!}{=} \delta \tilde{E}_0 = \tilde{a}_0 \langle \phi_0 | \tilde{V}_0 | \phi_0 \rangle - \sum_{i,j=0}^{\infty} \tilde{a}_i \tilde{a}_j \sum_{k>0} \frac{\langle \phi_0 | \tilde{V}_i | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \tilde{V}_j | \phi_0 \rangle}{\tilde{E}_k - \tilde{E}_0} + O(\tilde{a}_i^3) , \quad (1.36)$$

durch die \tilde{a}_0 als Funktion der \tilde{a}_i festgelegt ist. In führender Ordnung ist \tilde{a}_0 eine quadratische Funktion der \tilde{a}_i ; im zweiten Term von (1.36) brauchen wir deshalb (wir rechnen in zweiter Ordnung in \tilde{a}_i) nur die Summanden mit $i, j > 0$ zu berücksichtigen. Einsetzen der Nebenbedingung (1.36) in den Exponenten des Funktionalintegrals (1.25) beseitigt den linearen Term⁵ und wir erhalten die Sattelpunktsentwicklung

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\gamma} \int d^d x (V_{Sp} + \delta V)^2 &= -\frac{1}{g} \int d^d x \left(-\varphi_0^2 + \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{a}_i \tilde{V}_i \right)^2 \\ &= -\frac{1}{g} \left[S_0 + \sum_{i,j>0} \tilde{a}_i \tilde{a}_j \int d^d x d^d x' \tilde{V}_i(\mathbf{x}) \mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tilde{V}_j(\mathbf{x}') + O(\tilde{a}_i^3) \right] \end{aligned} \quad (1.37)$$

mit

$$\mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - 2 \varphi_0(\mathbf{x}) \sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}')}{\tilde{E}_k + 1} \varphi_0(\mathbf{x}') . \quad (1.38)$$

⁵d.h. man addiert zu $\frac{1}{2} \int V^2$ den Term $\rho \cdot (E_0[V] - E)$, siehe (1.10), so daß die lineare Variation $\frac{\delta}{\delta V}$ des Exponenten am Sattelpunkt verschwindet.

Die Integration über \tilde{a}_0 , d.h. senkrecht zu der Hyperfläche, wollen wir durch eine Integration über die Energie E_0 ersetzen; gemäß erster Ordnung Störungstheorie (siehe (1.36)) ist

$$\begin{aligned} dE_0 = |E| d\tilde{E}_0 &= |E| \langle \phi_0 | \tilde{V}_0 | \phi_0 \rangle d\tilde{a}_0 \\ &= |E| \frac{\|\varphi_0^2\|}{\|\varphi_0\|^2} d\tilde{a}_0 . \end{aligned} \quad (1.39)$$

Zusammen mit der Deltafunktion $\delta(E - E_0[V])$ erhält man also

$$\int \frac{d\tilde{a}_0}{\sqrt{\pi g}} \delta(E - E_0[V]) = \frac{1}{\sqrt{\pi g} |E|} \frac{\|\varphi_0\|^2}{\|\varphi_0^2\|} \cdot (1 + O(\tilde{a}_i)) . \quad (1.40)$$

Bisher haben wir die Translationssymmetrie des Modells noch nicht berücksichtigt. Die Wirkung ist invariant unter einer Verschiebung des Potentials und es gibt eine Schar von Sattelpunktpotentialen $V_{Sp}(\mathbf{x} - \mathbf{z}) = -|E| \varphi_0^2(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{z}}) = |E| \tilde{V}_{Sp}(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{z}})$, parametrisiert durch die Schwerpunktskoordinate \mathbf{z} . Entsprechend besitzt \mathcal{M} die Nullmoden

$$\left. \frac{\partial}{\partial z_i} \tilde{V}_{Sp}(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \right|_{z=0} = \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_0^2 \quad , \quad i = 1, \dots, d. \quad (1.41)$$

Um dies explizit zu sehen, leiten wir die Instantongleichung (1.17) nach x_i ab,

$$\left(-\Delta + 1 - 3\varphi_0^2 \right) \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0 , \quad (1.42)$$

multiplizieren mit $\sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x})}{\tilde{E}_k + 1}$ und integrieren über \mathbf{x} ,

$$\begin{aligned} 0 &= \int d^d x \sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}')}{\tilde{E}_k + 1} \phi_k(\mathbf{x}) \left(-\Delta + 1 - \varphi_0^2 - 2\varphi_0^2 \right) \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \\ &= \int d^d x \sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}')}{\tilde{E}_k + 1} \phi_k(\mathbf{x}) \left(\tilde{E}_k + 1 - 2\varphi_0^2 \right) \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \\ &= \int d^d x \left\{ \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} \phi_k(\mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x})}_{= \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})} - 2 \sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x})}{\tilde{E}_k + 1} \varphi_0^2(\mathbf{x}) \right\} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} , \end{aligned} \quad (1.43)$$

dabei haben wir die Eigenwertgleichung (1.32) für die ϕ_k benutzt und in der letzten Zeile den $k=0$ -Summanden, der wegen $\int \phi_0 \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0$ keinen Beitrag

liefert, hinzugenommen sowie die Vollständigkeit der ϕ_k ausgenutzt. Wenn wir noch mit $\varphi_0(\mathbf{x}')$ multiplizieren, erhalten wir unsere Behauptung

$$0 = \int d^d x \left\{ \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - 2 \varphi_0(\mathbf{x}') \sum_{k>0} \frac{\phi_k(\mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x})}{\tilde{E}_k + 1} \varphi_0(\mathbf{x}) \right\} \varphi_0(\mathbf{x}) \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i}, \quad (1.44)$$

also

$$\int d^d x \mathcal{M}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_0^2(\mathbf{x}) = 0. \quad (1.45)$$

Die Nullmoden von \mathcal{M} wählen wir als Basisfunktionen $\tilde{V}_1, \dots, \tilde{V}_d$,

$$\tilde{V}_i = -\frac{\partial \tilde{V}_{Sp}}{\partial \tilde{x}_i} \cdot \left\| \frac{\partial \tilde{V}_{Sp}}{\partial \tilde{x}_i} \right\|^{-1}. \quad (1.46)$$

Die Integration über die zugehörigen Variablen $\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_d$ ersetzen wir durch eine Integration über die Schwerpunktskoordinate \mathbf{z} der Sattelpunktslösung, die wir bisher Null gesetzt haben (siehe (1.21)). Die Jacobi-Determinante kann man an den Differentialen (i ist beliebig, aber fest) ablesen,

$$d\tilde{V} = -\frac{\partial \tilde{V}_{Sp}(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \tilde{x}_i} d\tilde{z}_i = \left\| \frac{\partial \tilde{V}_{Sp}(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \tilde{x}_i} \right\| \cdot \tilde{V}_i d\tilde{z}_i = \tilde{V}_i d\tilde{a}_i. \quad (1.47)$$

Die Integration über $\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_d$ ergibt damit einen Volumenfaktor und die Jacobi-Determinante der Transformation:

$$\int d^d z \left(\frac{1}{\sqrt{\pi g}} \left| \frac{\partial \tilde{z}_i}{\partial z_i} \right| \cdot \left\| \frac{\partial \varphi_0^2(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \tilde{x}_i} \right\| \right)^d = \text{Vol} \frac{|E|^{d/2}}{(\pi g)^{d/2}} \left\| \frac{\partial \varphi_0^2}{\partial x_i} \right\|^d. \quad (1.48)$$

Die Berechnung der Determinante von \mathcal{M} im Unterraum der \tilde{V}_i mit $i > d$, ist im Anhang A.1 beschrieben. Die Gaußschen Integrale ergeben den Faktor $(\det' \mathcal{M})^{-1/2}$: dies ist eine numerische Konstante, die unabhängig von den physikalischen Parametern E und γ ist.⁶

Wir fassen alle Beiträge (1.40), (1.48) und (A.9), (A.10) zusammen:

$$n(E) = \frac{|E|^{d/2-1} 2^{(d+1)/2}}{(\pi g)^{(d+1)/2}} \|\varphi_0\| \left\| \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \right\|^d \left[-\frac{\det'(-\Delta + 1 - 3\varphi_0^2)}{\det'(-\Delta + 1 - \varphi_0^2)} \right]^{-1/2} \times \exp \left[-\frac{1}{g} S_0 \right], \quad (1.49)$$

⁶Der Strich bedeutet, daß die Determinante ohne die Nullmoden berechnet wird.

mit $1/g = |E|^{2-d/2}/(2\gamma)$ (1.23). Wegen des Faktors $1/J$ in $(\det' \mathcal{M})^{-1/2}$ (A.10) sind die Normen von $\frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_0^2$ und φ_0^2 ersetzt durch diejenigen von $\frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_0$ und φ_0 . Gl. (1.49) ist genau derselbe Ausdruck, wie man ihn nach der Replika-Methode [9] bzw. der Supersymmetrie erhält! Genauer gesagt ist (1.49) die Verallgemeinerung des eindimensionalen Resultats von [6]; man erhält es durch eine Supersymmetrie-Rechnung, die völlig analog zu der Rechnung von Hayn und John ist, nur hat man in d Dimensionen d Translationsmoden, daher die Jacobi-Determinante $\left\| \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \right\|^d$. Es sei bemerkt, daß sich die Berechnung der Leitfähigkeit nicht so einfach von $d = 1$ auf $d > 1$ verallgemeinern läßt, da die Herleitung in [6] wesentlich auf der exakten Lösung der Sattelpunktgleichungen beruht.

In einer Dimension gibt es mehrere Methoden, den Quotienten der Determinanten analytisch zu bestimmen. Zuerst wurde er 1966 von Zittartz und Langer [13] berechnet; eine besonders elegante Herleitung ist bei Coleman [16] angegeben. In einer Dimension findet man⁷

$$\left[-\frac{\det'(-\Delta + 1 - 3\varphi_0^2)}{\det'(-\Delta + 1 - \varphi_0^2)} \right]^{-1/2} = \sqrt{3} \quad (1.50)$$

sowie (siehe (C.10), (C.8)) $\|\varphi_0\| = 2$ und $\left\| \frac{d\varphi_0}{dx} \right\| = 2/\sqrt{3}$ und wir erhalten schließlich ([12], [6], [17])

$$n(E) = \frac{4|E|}{\pi\gamma} \exp \left[-\frac{8|E|^{3/2}}{3\gamma} \right]. \quad (1.51)$$

Für Dimensionen $d > 1$ divergiert der Vorfaktor $(\det' \mathcal{M})^{-1/2}$. Dies ist ein Artefakt des verwendeten weißen Rauschens für die Unordnung. Die Einführung einer endlichen Korrelationslänge beseitigt diese Divergenz, siehe hierzu Kapitel 1.5. Die Abhängigkeit des Vorfaktors von dem Cutoff bzw. der Korrelationslänge läßt sich durch eine Renormierung der Energie beseitigen. In linearer Ordnung in dem Unordnungsparameter γ bedeutet dies eine Verschiebung der Energieskala.

Damit haben wir das Funktionalintegral (1.8) in der Sattelpunktsnäherung einschließlich der quadratischen Fluktuationen ausgewertet und erhalten für

⁷ $\det'(-\Delta + 1 - 3\varphi_0^2)$ enthält den negativen Eigenwert -3 , der bei [6], Formel (2.13), bereits herausgezogen ist.

die Zustandsdichte

$$n(E) = \text{const} \cdot (\pi g)^{-\frac{d+1}{2}} |E|^{d/2-1} \exp \left[-\frac{1}{g} S_0 \right] \quad (1.52)$$

$$= \text{const} \cdot (2\pi\gamma)^{-\frac{d+1}{2}} |E|^{d(5-d)/4} \exp \left[-S_0 \frac{|E|^{2-d/2}}{2\gamma} \right]. \quad (1.53)$$

Es sei nochmals betont, daß (1.52) der asymptotisch exakte Ausdruck für die Zustandsdichte für kleine Werte von g ist; Beiträge höherer Ordnung um den Sattelpunkt liefern Korrekturen ($1 + O(g)$). Demgegenüber sind die Beiträge von weiteren Sattelpunkten — falls der betrachtete gebundene Zustand mit der Energie $-|E|$ nicht der Grundzustand ist oder falls es weitere gebundene Zustände mit ähnlicher Energie gibt (Multi-Instanton-Beiträge) — von der Form $\exp[-S_i/g]$ mit $S_i \gg S_0$, also exponentiell unterdrückt gegenüber dem führenden Term. Wir sind hier weit weg von der Mobilitätskante. Man beachte, daß g sogar divergiert bei der Annäherung an $E = 0$ (bei festgehaltenem Unordnungsparameter γ).

1.5 Unordnung mit endlicher Korrelationslänge

1.5.1 Die Sattelpunktswirkung

Die in den letzten Abschnitten angegebene Rechnung läßt sich recht leicht auf den Fall einer allgemeinen Korrelationsfunktion $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ der Unordnung verallgemeinern. Die Wahrscheinlichkeits-Dichte für eine bestimmte Realisierung $V(\mathbf{x})$ des Zufallspotentials ist nun durch das Gewicht $P[V] = \exp(-S[V])$ gemäß (1.3) gegeben. Als Variationsgleichung für den Sattelpunkt erhält man

$$\int d^d x' W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x}') + \rho \frac{\delta}{\delta V(\mathbf{x})} E_0[V] = 0, \quad (1.54)$$

also mit (1.12)

$$V_{Sp}(\mathbf{x}) = -\rho \int d^d x' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_0^2(\mathbf{x}'), \quad (1.55)$$

wobei ψ_0 wieder der Grundzustand des Potentials V_{Sp} ist. Mit $\psi_{Sp} \equiv \sqrt{\rho} \psi_0$ erhalten wir die Sattelpunktsgleichung

$$\left(-\Delta + |E| - \int d^d x' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}') \right) \psi_{Sp}(\mathbf{x}) = 0. \quad (1.56)$$

Sie hat die Form einer Hartree-Gleichung, die man im allgemeinen numerisch lösen muß, siehe [3]. Die Sattelpunktswirkung lautet

$$S[V_{Sp}] = S_{Sp} = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' V_{Sp}(\mathbf{x}) W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V_{Sp}(\mathbf{x}') \quad (1.57)$$

$$= \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}'). \quad (1.58)$$

Wir diskutieren nun den Sattelpunktsbeitrag in Abhängigkeit von der Korrelationslänge des Zufallspotentials. Als konkretes Beispiel kann man die Korrelationsfunktion

$$W(\mathbf{x}) = \frac{\gamma}{\pi^{d/2} L^d} \exp(-x^2/L^2) \quad (1.59)$$

betrachten.

- Falls die Korrelationslänge L der Unordnung wesentlich kleiner als die durch die Bindungsenergie gegebene Längenskala $|E|^{-1/2}$ ist, kann man in der Sattelpunktsgleichung (1.56) $W(\mathbf{x})$ durch $\gamma \delta(\mathbf{x})$, mit $\gamma \equiv$

$\int d^d x W(\mathbf{x})$, ersetzen und erhält wieder denselben Sattelpunkt wie beim weißen Rauschen, d.h. (siehe (1.22) – (1.24))

$$S_{Sp} = S_0 |E|^{2-d/2} / (2\gamma) . \quad (1.60)$$

- Für Korrelationslängen $L \gg |E|^{-1/2}$ ist der Durchmesser des Potentialtopfes von der Ordnung L anstelle von $|E|^{-1/2}$, wobei die “Tiefe” des Potentials (bei vorgegebener Bindungsenergie) nur leicht verringert ist. Die Sattelpunktwirkung erhält also einen zusätzlichen (Volumen-) Faktor $\propto (L |E|^{1/2})^d$. Angewandt auf ein hinreichend glattes Potential liefert W^{-1} im wesentlichen nur den Faktor $1/\gamma$. Mit (1.57) folgt

$$S_{Sp} \propto \frac{|E|^2}{\gamma} L^d . \quad (1.61)$$

(Siehe hierzu auch die qualitativen Überlegungen mit einem Kastenpotential in [5].) Als Funktion der Energie gibt es also einen Übergang von $|E|^{2-d/2}$ zu einem $|E|^2$ – Verhalten des Exponenten der Zustandsdichte, d.h. zu einem Gaußschen Verhalten bei sehr niedrigen Energien, für die

$$|E| L^2 \gg 1 . \quad (1.62)$$

In der Arbeit [3] wurde für den dreidimensionalen Fall der Übergangsbereich von $\sqrt{|E|}$ zu $|E|^2$ – Abhängigkeit des Exponenten für verschiedene Formen der Korrelationsfunktion des Zufallspotentials numerisch untersucht. Sie finden in diesem Übergangsbereich ein linear-exponentielles Verhalten der Zustandsdichte in Übereinstimmung mit den experimentell beobachteten Urbach-Tails. Allerdings hängt die Ausdehnung des Übergangsbereichs stark von der Form der gewählten Korrelationsfunktion ab.

1.5.2 Die quadratischen Fluktuationen

Wir berücksichtigen wieder den Beitrag der Potentiale $V_{Sp} + \delta V$ zur Zustandsdichte,

$$n(E) = \frac{1}{\text{Vol}} \int \mathcal{D}(\delta V) \exp(-S[V_{Sp} + \delta V]) \delta(E - E_0[V_{Sp} + \delta V]) . \quad (1.63)$$

Mit unserer Normierung (1.6) lautet das Integrationsmaß (vgl. (1.26), (1.27))

$$\mathcal{D}(\delta V) = (\det W)^{-1/2} \prod_i \frac{da_i}{\sqrt{2\pi}} , \quad (1.64)$$

mit V_0 proportional zu $\psi_{S_p}^2$ (welches jetzt nicht mehr proportional zu V_{S_p} ist). Bei der Sattelpunktentwicklung fällt wieder der lineare Term heraus, wenn wir die Energie-Nebenbedingung in zweiter Ordnung Störungstheorie (1.11) berücksichtigen,

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{\infty} a_i \int d^d x d^d x' V_i(\mathbf{x}) W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V_{S_p}(\mathbf{x}') \\ &= -a_0 \int d^d x V_0 \psi_{S_p}^2 = - \sum_{k \neq 0} \frac{\langle \psi_0 | \delta V | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \delta V | \psi_0 \rangle}{E_k - E_0} \end{aligned} \quad (1.65)$$

(die ψ_k sind die Eigenzustände im Potential V_{S_p} , also $(-\Delta + V_{S_p})\psi_k = E_k \psi_k$) und wir erhalten

$$S = S_{S_p} + \frac{1}{2} \sum_{i,j>0} a_i a_j \int d^d x d^d x' V_i(\mathbf{x}) \mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') V_j(\mathbf{x}') \quad (1.66)$$

mit

$$\mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - 2 \psi_{S_p}(\mathbf{x}) \sum_{k>0} \frac{\psi_k(\mathbf{x}) \psi_k(\mathbf{x}')}{E_k + |E|} \psi_{S_p}(\mathbf{x}') . \quad (1.67)$$

Analog zu (1.40) und (1.48) liefert die Integration über a_0 und über die Translations-Nullmoden die Beiträge

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\|\psi_{S_p}\|^2}{\|\psi_{S_p}^2\|} \quad (1.68)$$

sowie

$$\frac{\text{Vol}}{(2\pi)^{d/2}} \|\partial_{x_i} V_{S_p}\|^d . \quad (1.69)$$

Wir erhalten also für die Zustandsdichte (1.63) mit (A.25), (A.26)

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\|\psi_{S_p}\|^2}{\|\psi_{S_p}^2\|} \frac{\|\partial_{x_i} V_{S_p}\|^d}{(2\pi)^{d/2}} (\det' \mathcal{M} \cdot \det W)^{-1/2} \cdot \exp(-S_{S_p}) \quad (1.70) \\ &= \frac{\|\psi_{S_p}\| \|\partial_{x_i} \psi_{S_p}\|^d}{(2\pi)^{(d+1)/2}} \left[-\frac{\det'(\Gamma - 2 \psi_{S_p} W \psi_{S_p})}{\det' \Gamma} \right]^{-1/2} \cdot \exp(-S_{S_p}) . \end{aligned} \quad (1.71)$$

Im letzten Schritt haben wir die Determinante von \mathcal{M} als Quotient zweier Determinanten ausgedrückt. Die Rechnung hierzu ist in Anhang A.2 angegeben. Die Gleichung (1.71) stimmt mit der Replika-Rechnung (Abschnitt IV

in [3]) überein. Im Limes des weißen Rauschens geht dieses Resultat natürlich wieder in (1.49) über.

Wir wollen nun etwas genauer auf die Renormierung der Energie in drei Dimensionen eingehen. In Anhang B.2 zeigen wir, daß der Vorfaktor in der Zustandsdichte proportional zu $\exp(Q \int \psi_{Sp}^2)$ ist, wobei Q gemäß (B.12) wie $\frac{1}{L}$ divergiert. Dieser Term wird nun (in führender Ordnung in der Unordnungsstärke γ) durch eine Verschiebung der Energie eliminiert. Diese Energieverschiebung entspricht zugleich der “mittleren Energieabsenkung” in 2. Ordnung Störungstheorie durch die typischen Abweichungen ($\delta V(\mathbf{x})$) des Unordnungspotentials von der exakten Form des Sattelpunktpotentials. Dies ist zugleich die Verschiebung der CPA-Mobilitätskante gegenüber dem Mittelwert des Potentials $\langle V \rangle = 0$ [8], [3].

Kapitel 2

Die dynamische Leitfähigkeit

2.1 Die Mott-Formel

Die Kubo-Formel für den Realteil der frequenzabhängigen Leitfähigkeit lautet:

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega, E) = -\frac{\pi e^2}{2d} \omega^2 \int d^d x \mathbf{x}^2 S_2(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

$$S_2(\mathbf{x}) = \left\langle \sum_{\mu, \nu} \psi_\mu^*(0) \psi_\mu(\mathbf{x}) \psi_\nu^*(\mathbf{x}) \psi_\nu(0) \delta\left(E - \frac{\omega}{2} - E_\mu\right) \delta\left(E + \frac{\omega}{2} - E_\nu\right) \right\rangle \quad (2.2)$$

$\langle \dots \rangle$ steht für die Unordnungsmittelung (1.6). Tief im Isolatorbereich und für kleine ω kommt der Hauptbeitrag vom Tunneln zwischen zwei Potentialtöpfen im Abstand D . Es gibt einen minimalen Abstand D_0 , denn der Tunneleffekt bewirkt eine Niveauabstoßung

$$\Delta E \sim \exp(-D/\xi) , \quad (2.3)$$

die höchstens gleich dem vorgegebenen Energieunterschied ω sein darf, $\Delta E(D_0) = \omega$. Für $D > D_0$ gleichen wir die geringere Tunnelaufspaltung durch eine leicht unterschiedliche Tiefe der beiden Potentialtöpfe aus. Für $D < D_0$ ist das nicht möglich.

Der Hauptbeitrag stammt von den Potentialtöpfen mit dem minimalen Abstand

$$D_0 \sim |\ln \omega| \xi ; \quad (2.4)$$

damit ist $\int d^d x \mathbf{x}^2 S_2(\mathbf{x}) \propto D_0^{d-1} D_0^2$ und wir erhalten die Mott-Formel [22],[23]

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \sim \omega^2 |\ln \omega|^{d+1} . \quad (2.5)$$

2.2 Der Zwei-Instanton-Sattelpunkt

Um die obigen qualitativen Überlegungen zu überprüfen, werden wir im folgenden für das Modell des gaußschen weißen Rauschens die Unordnungsmittelung für die 2-Teilchen-Spektralfunktion (2.2) durchführen. Die Vorgehensweise ist analog zur Berechnung der Zustandsdichte in Kapitel 1, nur gibt es jetzt zwei Nebenbedingungen anstatt einer.

2.2.1 Herleitung der Sattelpunktgleichungen

Wir betrachten also Potentiale mit zwei gebundenen Zuständen bei den Energien E_1 und E_2 , die wir schreiben als

$$E_{1/2} = -|E|(1 \pm \bar{\omega}) \quad , \quad 0 < \bar{\omega} = \frac{\omega}{2|E|} < 1 . \quad (2.6)$$

Den Hauptbeitrag zum Funktionalintegral (2.2) liefern wieder diejenigen Potentiale, für die das Gaußsche Gewicht maximal bzw. $\int d^d x V^2$ minimal ist. Da nun zwei Nebenbedingungen zu erfüllen sind, enthält die Variationsgleichung für das Sattelpunkts-Potential zwei Lagrangemultiplikatoren ρ_1 und ρ_2 . Die Variation der beiden Bindungsenergien $E_{1/2}$ nach dem Potential liefert wie in (1.11) das Quadrat der zugehörigen Wellenfunktionen $\psi_{1/2}$, also erhalten wir die Bedingung

$$V_{Sp}(\mathbf{x}) = -\rho_1 \psi_1^2(\mathbf{x}) - \rho_2 \psi_2^2(\mathbf{x}) , \quad (2.7)$$

zusammen mit den Schrödingergleichungen $(-\Delta + V_{Sp})\psi_{1/2} = E_{1/2}\psi_{1/2}$. Wie bei der Berechnung der Zustandsdichte reskalieren wir die Koordinaten und Felder (siehe (1.15))

$$\psi_{1/2}(\mathbf{x}) = \left(\frac{|E|}{\rho_{1/2}} \right)^{1/2} \varphi_{1/2}(\tilde{\mathbf{x}}) \quad , \quad \tilde{\mathbf{x}} = |E|^{1/2} \mathbf{x} . \quad (2.8)$$

Die noch zu bestimmenden Lagrangemultiplikatoren stecken wir also in die Normierung der Felder $\varphi_{1/2}$. Eingesetzt in die Schrödingergleichungen $H\psi_{1/2} = E_{1/2}\psi_{1/2}$ erhalten wir für $\varphi_{1/2}$ die beiden gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungen

$$\left(-\Delta + 1 \pm \bar{\omega} - \varphi_1^2 - \varphi_2^2 \right) \varphi_{1/2}(\mathbf{x}) = 0 . \quad (2.9)$$

Dies sind die Gleichungen für den Zwei-Instanton-Sattelpunkt, die wir nun — zumindest näherungsweise — lösen wollen.

In *einer* Dimension kann man x als Zeitkoordinate auffassen und φ_1, φ_2 als Ortskoordinaten. Die Gleichungen (2.9) sind dann die Bewegungsgleichungen eines klassischen Teilchens in einem zweidimensionalen Potential. Dieses System ist integrierbar und man kann die Lösungen exakt angeben [6]: Es gibt eine ganze Schar von Lösungen, die neben der frei wählbaren Schwerpunktskoordinate von einem weiteren Parameter abhängt, der dem Abstand der beiden Potentialtöpfe entspricht.

Für Dimensionen $d > 1$ besteht kein solcher Zusammenhang mit einem integrierbaren System und wir sind auf die Konstruktion von Näherungslösungen angewiesen. Eine weitgehend analytische Vorgehensweise ist möglich für $\bar{\omega} \rightarrow 0$, d.h. wir entwickeln im folgenden in dem kleinen Parameter $\bar{\omega}$.

2.2.2 Ansatz zur Lösung der Sattelpunktgleichungen

Wir suchen Potentiale mit zwei nahe beieinander liegenden Energieeigenwerten $-1 \mp \bar{\omega}$. Da die Wirkung $\int d^d x V^2$ minimal sein soll, kommt ein einziger, “großer” Potentialtopf nicht in Frage, sondern wir gehen aus von zwei separaten Potentialtöpfen im Abstand D voneinander. Der Überlapp der zugehörigen Wellenfunktionen wird dabei höchstens von der Ordnung $\bar{\omega}$ sein. Wir machen den Ansatz

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \tilde{\varphi}_l + \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \tilde{\varphi}_r = R(\theta) \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_l \\ \tilde{\varphi}_r \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

wobei $\tilde{\varphi}_l, \tilde{\varphi}_r$ im wesentlichen die Wellenfunktionen der einzelnen Potentialtöpfe sind, d.h. in nullter Ordnung in $\bar{\omega}$ sind $\tilde{\varphi}_{l/r}$ die kugelsymmetrischen Instantonlösungen aus Kap. 1 (siehe (1.17)) mit Zentrum bei $\mp \frac{D}{2} \hat{e}_x$. Der Mischungswinkel θ ergibt sich als Funktion des Abstandes $D \geq D_0$ der Instantonen. Beim minimalen Abstand D_0 ist das Potential spiegelsymmetrisch ($x \rightarrow -x$) und $\theta = \pi/4$, d.h. $\varphi_{1/2}$ sind die symmetrische bzw. die antisymmetrische Linearkombination der $\tilde{\varphi}_{l/r}$. Mit

$$R^{-1} \begin{pmatrix} \bar{\omega} & 0 \\ 0 & -\bar{\omega} \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} \eta & t \\ t & -\eta \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

wobei wir definiert haben

$$\begin{aligned}\eta &= \bar{\omega} \cos 2\theta , \\ t &= \bar{\omega} \sin 2\theta ,\end{aligned}\tag{2.12}$$

wird (2.9) zu

$$\left(-\Delta + 1 \pm \eta - \tilde{\varphi}_l^2 - \tilde{\varphi}_r^2 \right) \tilde{\varphi}_{l/r} = -t \tilde{\varphi}_{r/l} .\tag{2.13}$$

η beschreibt die Asymmetrie zwischen den Potentialtöpfen und t ist das Tunnel-Matrixelement. In Ordnung $\bar{\omega}$ berücksichtigen wir die leicht unterschiedliche Tiefe der beiden Potentialtöpfe durch eine Reskalierung der Instantonen:

$$\varphi_{l/r} = \sqrt{1 \pm \eta} \varphi_0 \left(\sqrt{1 \pm \eta} \left| \mathbf{x} \pm \frac{D}{2} \hat{e}_x \right| \right) .\tag{2.14}$$

φ_l und φ_r erfüllen die Gleichungen

$$\left(-\Delta + 1 \pm \eta - \varphi_{l/r}^2 \right) \varphi_{l/r} = 0 .\tag{2.15}$$

Aufgrund der Überlapp- und Kopplungsterme in (2.13) gibt es weitere Korrekturen von der Ordnung $\bar{\omega}$, wir setzen deshalb

$$\tilde{\varphi}_{l/r} = \varphi_{l/r} + \delta\varphi_{l/r}\tag{2.16}$$

und erhalten für $\delta\varphi_{l/r}$ die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\left(-\Delta + 1 + \eta - 3\varphi_l^2 - \varphi_r^2 \right) \delta\varphi_l &= \varphi_r^2 \varphi_l - t \varphi_r - \\ &\quad -t \delta\varphi_r + 2\varphi_l \varphi_r \delta\varphi_r + \varphi_l (\delta\varphi_r)^2 + O(\bar{\omega}^3),\end{aligned}\tag{2.17}$$

$$\begin{aligned}\left(-\Delta + 1 - \eta - \varphi_l^2 - 3\varphi_r^2 \right) \delta\varphi_r &= \varphi_l^2 \varphi_r - t \varphi_l - \\ &\quad -t \delta\varphi_l + 2\varphi_l \varphi_r \delta\varphi_l + \varphi_r (\delta\varphi_l)^2 + O(\bar{\omega}^3).\end{aligned}\tag{2.18}$$

Wir wollen auf der rechten Seite zunächst jeweils nur die ersten beiden Terme berücksichtigen, also sind (2.17) und (2.18) lineare Differentialgleichungen für $\delta\varphi_l$ bzw. $\delta\varphi_r$. Die rechte Seite von (2.17) hat ihr Maximum im Bereich des rechten Topfes ($\varphi_r \sim 1$) und ist dort von der Ordnung $\bar{\omega}$. Wir können daraus folgern, daß auch $\delta\varphi_l$ höchstens $O(\bar{\omega})$ ist¹, und entsprechend $\delta\varphi_r$ gemäß

¹bis auf Anteile proportional zu den Nullmoden des Klammerausdrucks auf der linken Seite, siehe unten.

(2.18). Man beachte, daß $\varphi_l \varphi_r$ höchstens $O(\bar{\omega})$ ist. Die Terme in der zweiten Zeile von (2.17)/(2.18) sind damit nur zweiter Ordnung in $\bar{\omega}$, dies rechtfertigt unsere Vorgehensweise.

Im Bereich des *linken* Topfes sind alle Terme auf der rechten Seite von (2.17) zweiter Ordnung in $\bar{\omega}$, also ist dort auch $\delta\varphi_l$ nur $O(\bar{\omega}^2)$. Im Bereich des *rechten* Topfes sind φ_l und $\delta\varphi_l$ beide von der gleichen Größenordnung $O(\bar{\omega})$.

Wie bereits erwähnt, haben noch zu beachten, daß der Operator auf der linken Seite von (2.17) in nullter Ordnung in $\bar{\omega}$ die Nullmoden φ_r und $\frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_l$ (wegen der Translationsinvarianz, siehe (1.42)) besitzt: Die rechte Seite muß hierzu in führender Ordnung orthogonal sein, wenn wir nach $\delta\varphi_l$ auflösen wollen. Für die Moden $\frac{\partial}{\partial x_i} \varphi_l$ ist das erfüllt (mit den Termen zweiter Ordnung werden wir uns später noch beschäftigen). Die Mode φ_r legt t und damit den Winkel θ fest: Wenn wir (2.17) mit φ_r multiplizieren und integrieren, so verschwindet die linke Seite nach partieller Integration und wir erhalten²

$$t = \frac{\int \varphi_l \varphi_r^3}{\int \varphi_r^2} + O(\bar{\omega}^2) \quad (2.19)$$

$$= c e^{-D} D^{-\frac{d-1}{2}} \cdot (1 + O(1/D)) . \quad (2.20)$$

Im letzten Schritt haben wir das asymptotische Verhalten $\varphi_0(r) \propto e^{-r} r^{-(d-1)/2}$ (1.20) benutzt; der Vorfaktor c ist eine numerische Konstante.³ Für $d = 3$ ist der relative Fehler nur $O(e^{-D})$. Wegen $t = \bar{\omega}$ für $D = D_0$ finden wir den Zusammenhang zwischen $\bar{\omega}$ und dem minimalen Abstand D_0 ,

$$\bar{\omega} = c e^{-D_0} D_0^{-\frac{d-1}{2}} \quad (2.21)$$

und zugleich den Winkel θ als Funktion des Abstandes $D \geq D_0$,

$$\sin 2\theta = e^{-(D-D_0)} \left(\frac{D}{D_0} \right)^{-\frac{d-1}{2}} . \quad (2.22)$$

²Bei den Integralen lassen wir im folgenden das Volumenelement $d^d x$ weg.

³Für $d = 3$ findet man numerisch $c = 4.8938$.

2.2.3 Die Sattelpunktswirkung

Mit dem obigen Ansatz können wir die Wirkung S/g in zweiter Ordnung in $\bar{\omega}$ bestimmen. Es ist

$$\begin{aligned}
S &= \int (\tilde{\varphi}_l^2 + \tilde{\varphi}_r^2)^2 \\
&= \int \varphi_l^4 + \int \varphi_r^4 + 2 \int \varphi_l^2 \varphi_r^2 \\
&\quad + \int (4\varphi_l^3 \delta\varphi_l + 4\varphi_l \delta\varphi_l \varphi_r^2 + 2(\delta\varphi_l)^2 \varphi_r^2 + 6\varphi_l^2 (\delta\varphi_l)^2 + (l \leftrightarrow r))
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Wenn wir (2.17) mit φ_l multiplizieren und aufintegrieren,

$$0 = \int (2\varphi_l^3 \delta\varphi_l + \varphi_r^2 \varphi_l \delta\varphi_l + \varphi_l^2 \varphi_r^2 - t \varphi_l \varphi_r - t \varphi_l \delta\varphi_r + 2\varphi_l^2 \varphi_r \delta\varphi_r + \varphi_l^2 (\delta\varphi_r)^2), \tag{2.24}$$

und entsprechend für (2.18) ($l \leftrightarrow r, \eta \rightarrow -\eta$), erhalten wir

$$S = \int (\varphi_l^4 + \varphi_r^4 - 2\varphi_l^2 \varphi_r^2 + 4t \varphi_l \varphi_r - 2(\delta\varphi_l(\varphi_r^2 \varphi_l - t \varphi_r) + (l \leftrightarrow r))) . \tag{2.25}$$

Im letzten Term benötigt man $\delta\varphi_l$ nur in der Umgebung des rechten Topfes und auch nur den Anteil orthogonal zu φ_r . Q_r sei der Projektor auf den Raum orthogonal zu φ_r . Die Lösung von (2.17) in diesem Unterraum ist (in führender Ordnung in $\bar{\omega}$)

$$Q_r \delta\varphi_l = G_r (\varphi_r^2 \varphi_l - t \varphi_r), \tag{2.26}$$

wobei

$$G_r = Q_r (Q_r (-\Delta + 1 - \varphi_r^2) Q_r)^{-1} Q_r . \tag{2.27}$$

Wir bringen den Term auf die in [7], Formel (3.29) angegebene Form,

$$\int \varphi_r^2 \varphi_l Q_r \delta\varphi_l = \int \varphi_r^2 \varphi_l G_r \varphi_r^2 \varphi_l . \tag{2.28}$$

Wir betrachten nun das asymptotische Verhalten der einzelnen Terme: Der Term (2.28) ist proportional zum Wert von φ_l^2 im Zentrum des rechten Potentialtopfes, also proportional zu t^2 . Wegen der Reskalierung (2.14) ist

$$\int \varphi_{l/r}^4 = (1 \pm \eta)^{2-d/2} \cdot \int \varphi_0^4 . \tag{2.29}$$

Die Überlappintegrale in (2.25) betrachten wir zunächst für den eindimensionalen Fall. Auf der Verbindungsstrecke der beiden Töpfe ist $\varphi_l \varphi_r$ näherungsweise konstant ($\propto e^{-|x+D/2|} e^{-|x-D/2|} = e^{-D}$) und die Integration liefert einen Faktor D . Mit der Instantonlösung $\varphi_0(x) = \sqrt{2}/\cosh(x)$ aus Kap. 1 erhalten wir ⁴

$$\int \varphi_l \varphi_r = 2D \cdot t \quad , \quad t = 4e^{-D} \quad , \quad (2.30)$$

$$\int \varphi_l^2 \varphi_r^2 = 4(D-1) \cdot t^2 \quad . \quad (2.31)$$

In einer Dimension hebt sich damit die führende $D \cdot t^2$ -Abhängigkeit in (2.25) weg. Im nächsten Unterkapitel zeigen wir, daß in einer Dimension auch die übrigen Terme $\propto t^2$ herausfallen.

Für Dimensionen $d > 1$ benutzen wir $\varphi_0(r) \propto e^{-r} r^{-(d-1)/2}$ und finden wie im eindimensionalen Fall (vgl. Formel (3.42) in [7])

$$\int \varphi_l \varphi_r \propto D \cdot t \quad . \quad (2.32)$$

Allerdings ist⁵

$$\int \varphi_l^2 \varphi_r^2 \propto t^2 \cdot \begin{cases} D^{(3-d)/2} & d < 3 \\ \ln D & d = 3 \\ 1 & d > 3 \end{cases} \quad (2.33)$$

In $d > 1$ Dimensionen dominiert für genügend kleine $\bar{\omega}$, d.h. große Abstände, der Term $t \int \varphi_l \varphi_r$ das Verhalten der Wirkung und wir erhalten

$$\begin{aligned} S(D) &= \left\{ (1 + \bar{\omega})^{2-d/2} + (1 - \bar{\omega})^{2-d/2} \right\} \int \varphi_0^4 \\ &+ \alpha e^{-2D} D^{2-d} \cdot (1 + O(D^{(1-d)/2}, D^{-1})) \quad . \quad (2.34) \end{aligned}$$

Für $d=3$ ist der Korrekturfaktor $(1 - 1.504 \frac{\ln D}{D})$; α ist eine positive numerische Konstante.

Da die Wirkung (für $d > 1$) explizit vom Abstand D der Instantonen abhängt, können die Sattelpunktgleichungen (2.9) keine exakten Lösungen besitzen,

⁴Die Reskalierung in (2.14) ist in führender Ordnung in $\bar{\omega}$ vernachlässigbar.

⁵Für $d = 3$ finde ich ein etwas anderes Resultat als in [7], Formel (3.42 c) angegeben: dort steht $(\ln D)^2$ anstelle von $\ln D$.

denn die Wirkung ist unter Variationen des Abstandes nicht stationär! Man kann sich die Wirkung im Funktionenraum als ein Tal in einem (hochdimensionalen) Gebirge vorstellen: $(D, \theta(D))$ parametrisiert die Position im Tal, nur für $d = 1$ ist der Talboden aber völlig flach. Die Variationen senkrecht zum Tal können in Sattelpunktsnäherung berechnet werden, die Integration längs des Tales über die “Quasi-Nullmode” dV_{Sp}/dD wird später exakt ausgeführt. Formal benötigt man deshalb in (2.9) wegen der Nichtstationarität von $S(D)$ einen Zusatzterm, siehe Anhang D, der allerdings vernachlässigbar ist, da er sich in der Wirkung erst in Ordnung $\bar{\omega}^4$ bemerkbar macht.

2.2.4 Der eindimensionale Fall

In einer Dimension können wir den verbliebenen Term (2.28) explizit angeben. Mit $\varphi_{l/r}(x) = \sqrt{2}/\cosh(x_{l/r})$, $x_{l/r} = x \pm \frac{D}{2}$ und $t = 4e^{-D}$ (2.30) folgt⁶

$$\varphi_l \varphi_r^2 = t \left(1 + \frac{d}{dx}\right) \varphi_r + O(t^2) . \quad (2.36)$$

Desweiteren gilt

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + 1 - \varphi_0^2\right) \frac{x}{2} \varphi_0 = -\frac{d}{dx} \varphi_0 . \quad (2.37)$$

Da $x\varphi_0$ und $\partial_x \varphi_0$ ungerade, also orthogonal zu φ_0 sind, können wir (2.37) mit dem in (2.27) definierten Operator G_r auflösen,

$$\frac{x_r}{2} \varphi_r = -G_r \left(\frac{d}{dx} \varphi_r\right) \quad (2.38)$$

und mit (2.36) ist

$$\frac{t}{2} x_r \varphi_r = -G_r \left(\varphi_l \varphi_r^2\right) . \quad (2.39)$$

Wenn wir (2.36) noch einmal anwenden, erhalten wir schließlich

$$\int \varphi_l \varphi_r^2 G_r \varphi_r^2 \varphi_l = \int t \left(\frac{d}{dx} \varphi_r\right) G_r \varphi_r^2 \varphi_l$$

⁶Es ist

$$\left(1 + \frac{d}{dx}\right) \frac{1}{\cosh x} = \frac{e^{-x}}{\cosh^2 x} . \quad (2.35)$$

Den Vorfaktor in (2.36) überprüft man sofort durch Multiplikation mit φ_r und der Definition (2.19) von t .

$$\begin{aligned}
&= -\frac{t^2}{2} \int \left(\frac{d}{dx} \varphi_r \right) x_r \varphi_r = -\frac{t^2}{4} \int x \frac{d}{dx} \varphi_0^2 \\
&= \frac{t^2}{4} \int \varphi_0^2 = t^2
\end{aligned} \tag{2.40}$$

und für die Wirkung (2.25) folgt

$$\begin{aligned}
S(D) &= \left\{ (1 + \eta)^{3/2} + (1 - \eta)^{3/2} \right\} \int \varphi_0^4 - 2 \int \varphi_l^2 \varphi_r^2 + 4t \int \varphi_l \varphi_r \\
&\quad - 4 \int \varphi_l \varphi_r^2 G_r \varphi_r^2 \varphi_l \\
&= \left\{ 2 + \frac{3}{4} (\bar{\omega}^2 - t^2) \right\} \frac{16}{3} - 8(D - 1) t^2 + 8Dt^2 - 4t^2 \\
&= \frac{32}{3} + 4\bar{\omega}^2 (+O(\bar{\omega}^4)) .
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Wir haben also gezeigt, daß in einer Dimension die Sattelpunktswirkung, zumindest in zweiter Ordnung in $\bar{\omega}$, unabhängig vom Abstand $D \geq D_0$ der Instantonen ist.

In [6] wurde eine Schar von exakten Lösungen der Sattelpunktsgleichungen (2.9) angegeben, die mit unserem Ansatz in $O(\bar{\omega})$ übereinstimmt. Das ist nicht ganz offensichtlich wegen der komplizierten Parametrisierung der Lösungen in [6], wir wollen aber die Rechnung hier nicht angeben. Daraus folgt insbesondere, daß die Sattelpunktswirkung in einer Dimension unabhängig vom Abstand ist und damit einfach gleich der Summe der Beiträge der unabhängigen Potentialtöpfe für $D \rightarrow \infty$ ist, d.h. es gilt exakt

$$S = \frac{16}{3} \left\{ (1 + \bar{\omega})^{3/2} + (1 - \bar{\omega})^{3/2} \right\} . \tag{2.42}$$

Wenn wir das für kleine $\bar{\omega}$ entwickeln, stimmt es natürlich mit (2.41) überein.

2.3 Der Beitrag der quadratischen Fluktuationen

Wir bestimmen nun den Beitrag der Potentiale in der Umgebung des Sattelpunktes V_{Sp} bzw., nach Reskalierung, $\tilde{V}_{Sp} = -\varphi_1^2 - \varphi_2^2$. Die Abweichung von V_{Sp} entwickeln wir wieder in einer Orthonormal-Basis $\{V_i\}$,⁷

$$\delta V(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i V_i(\mathbf{x}) , \quad (2.43)$$

mit V_1 proportional zu V_{Sp} ,

$$V_1 = \frac{1}{N_1}(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) , \quad (2.44)$$

und V_2 sei die zu V_1 orthogonale Linearkombination von φ_1^2 und φ_2^2 .

Analog zur Vorgehensweise bei der Zustandsdichte in Kap. 1.2 berechnen wir die Änderung der Energien der beiden gebundenen Zustände in zweiter Ordnung Störungstheorie. Die (normierten) Eigenfunktionen und Eigenwerte des ungestörten Systems bezeichnen wir wieder mit ϕ_k und E_k ,

$$(-\Delta + V_{Sp}) \phi_k = E_k \phi_k , \quad (2.45)$$

wobei $E_{1/2} = -1 \mp \bar{\omega}$ und $E_k > 0$ für $k > 2$.

Die Forderung, daß sich die Bindungsenergien $E_{1/2}$ durch die Störung δV nicht ändern sollen, ergibt die beiden Bedingungen (jeweils $+O(\delta V^3)$)

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \phi_1 | \delta V | \phi_1 \rangle - \frac{1}{2\bar{\omega}} |\langle \phi_1 | \delta V | \phi_2 \rangle|^2 - \sum_{k>2} \frac{1}{E_k - E_1} |\langle \phi_1 | \delta V | \phi_k \rangle|^2 , \\ 0 &= \langle \phi_2 | \delta V | \phi_2 \rangle + \frac{1}{2\bar{\omega}} |\langle \phi_2 | \delta V | \phi_1 \rangle|^2 - \sum_{k>2} \frac{1}{E_k - E_2} |\langle \phi_2 | \delta V | \phi_k \rangle|^2 . \end{aligned} \quad (2.46)$$

Wir multiplizieren die Gleichungen mit $\|\varphi_1\|^2$ bzw. $\|\varphi_2\|^2$ und addieren sie (beachte $\|\phi_{1/2}\| = 1$):

⁷Wir lassen im folgenden die Tilden bei a_i, V_i, V_{Sp}, E_i bis zu Kap. 2.3.5 weg, wo die Dimensions-Faktoren wieder eine Rolle spielen

$$\begin{aligned}
\int (\varphi_1^2 + \varphi_2^2) a_1 V_1 &= \int \delta V(\mathbf{x}) \varphi_1(\mathbf{x}) \sum_{k \neq 1} \frac{\phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}')}{E_k - E_1} \varphi_1(\mathbf{x}') \delta V(\mathbf{x}') d^d x d^d x' \\
&+ \int \delta V(\mathbf{x}) \varphi_2(\mathbf{x}) \sum_{k \neq 2} \frac{\phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{x}')}{E_k - E_2} \varphi_2(\mathbf{x}') \delta V(\mathbf{x}') d^d x d^d x' \\
&= \int \delta V^\perp(\mathbf{x}) \varphi^\top(\mathbf{x}) \Gamma_\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x}') \delta V^\perp(\mathbf{x}') d^d x d^d x'
\end{aligned} \tag{2.47}$$

mit

$$\Gamma_\varepsilon = (-\Delta + V_{Sp}) \mathbf{1} - \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} - \varepsilon \varphi \varphi^\top, \tag{2.48}$$

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}. \tag{2.49}$$

δV^\perp bezeichnet die Fluktuationen orthogonal zu $\varphi_1^2(\mathbf{x})$ und $\varphi_2^2(\mathbf{x})$, d.h. den Anteil mit $a_1 = a_2 = 0$. In Γ_ε ist der Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ gemeint. Damit erhalten wir

$$\int (V_{Sp} + \delta V)^2 = \int V_{Sp}^2 + \int \delta V^\perp(\mathbf{x}) \mathcal{M}_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta V^\perp(\mathbf{x}') d^d x d^d x' \tag{2.50}$$

mit

$$\mathcal{M}_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - 2 \varphi^\top(\mathbf{x}) \Gamma_\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x}') . \tag{2.51}$$

Die Integration über a_1 und a_2 wird ersetzt durch eine Integration über die beiden Energien $E_{1/2}(V)$; zusammen mit den beiden δ -Funktionen im Funktionalintegral (2.2) erhalten wir gerade das Quadrat des 1-Instanton-Beitrages (1.40):

$$\int \frac{da_1}{\sqrt{\pi g}} \frac{da_2}{\sqrt{\pi g}} \delta(E - E_1[V]) \delta(E - E_2[V]) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi g} |E|} \frac{\|\varphi_0\|^2}{\|\varphi_0^2\|} \right\}^2 \tag{2.52}$$

Die Determinante von \mathcal{M}_ε können wir in völliger Analogie zum 1-Instanton-Fall (A.3) als Quotient schreiben,

$$\det \mathcal{M}_\varepsilon = \det(\Gamma_\varepsilon - 2 \varphi \varphi^\top) / \det \Gamma_\varepsilon, \tag{2.53}$$

wobei nun Γ_ε und $\varphi\varphi^\top$ jeweils 2×2 - Matrizen sind.

Dies entspricht dem supersymmetrischen Ausdruck, wenn wir, genau wie bei der Zustandsdichte (Anhang B.1), die beiden Nullmoden $\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ von Γ_ε herausdividieren sowie die entsprechenden Moden V_1 und V_2 von \mathcal{M}_ε .

2.3.1 Die Berechnung der Determinante

Man kann nun der supersymmetrischen Rechnung [6] folgen. Das größte Stück Arbeit ist dabei die Berechnung der Nullmoden des Operators $\mathcal{O}_x = \Gamma - 2\varphi\varphi^\top$ in erster Ordnung in $\bar{\omega}$.

Wir wollen hier zunächst einen etwas anderen Weg angeben, um direkt die Eigenwerte von \mathcal{M} zu bestimmen. Insbesondere werden wir sehen, daß im Gegensatz zu \mathcal{O}_x keine “gefährlich” kleinen Eigenwerte proportional zu $\bar{\omega}$ auftreten. Diese Eigenwerte führen zur Beschränkung der supersymmetrischen Rechnung auf den Limes “schwacher Unordnung”.

Es sei V_i eine Eigenfunktion von \mathcal{M}_ε mit Eigenwert $1 - \frac{2}{\lambda_i}$,

$$(1 - 2\varphi^\top \Gamma_\varepsilon^{-1} \varphi) V_i = \left(1 - \frac{2}{\lambda_i}\right) V_i. \quad (2.54)$$

Dann erfüllt die 2-komponentige Funktion

$$\Psi_i \equiv \lambda_i \Gamma_\varepsilon^{-1} \varphi V_i \quad (2.55)$$

die Gleichungen

$$\varphi^\top \Psi_i = V_i \quad (2.56)$$

und

$$(\Gamma_\varepsilon - \lambda_i \varphi \varphi^\top) \Psi_i = 0. \quad (2.57)$$

Es genügt also, die Lösungen Ψ_i, λ_i der beiden gekoppelten Gleichungen (2.57) zu finden. Über (2.56) erhält man dann die zugehörigen Eigenfunktionen V_i .⁸ An (2.57) liest man ferner ab, daß der Zusatzterm $-\varepsilon \varphi \varphi^\top$ in Γ_ε lediglich eine Verschiebung $\lambda_i \rightarrow \lambda_i + \varepsilon$ bewirkt, ohne Ψ_i oder V_i zu verändern, und wir können nun $\varepsilon = 0$ setzen.

⁸außer falls $\varphi^\top \Psi_i \equiv 0$, d.h. $\Psi_i(\mathbf{x}) \propto \begin{pmatrix} \varphi_2(\mathbf{x}) \\ -\varphi_1(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$. Das ist aber keine Lösung von (2.57).

Mit dem Ansatz (2.10) für φ ist

$$\Gamma - \lambda_i \varphi \varphi^\top = R \left[(-\Delta + 1 - \tilde{\varphi}_l^2 - \tilde{\varphi}_r^2) \mathbf{1} + \begin{pmatrix} \eta & t \\ t & -\eta \end{pmatrix} - \lambda_i \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_l^2 & \tilde{\varphi}_l \tilde{\varphi}_r \\ \tilde{\varphi}_l \tilde{\varphi}_r & \tilde{\varphi}_r^2 \end{pmatrix} \right] R^\top . \quad (2.58)$$

In nullter Ordnung in $\bar{\omega}$ ist das

$$= R \begin{pmatrix} -\Delta + 1 - (1 + \lambda_i) \varphi_{l,0}^2 - \varphi_{r,0}^2 & 0 \\ 0 & -\Delta + 1 - \varphi_{l,0}^2 - (1 + \lambda_i) \varphi_{r,0}^2 \end{pmatrix} R^\top \quad (2.59)$$

und die λ_i sind durch die bereits beim 1-Instanton-Problem auftretende Gleichung (Anh. B.1, [1])

$$(-\Delta + 1 - (1 + \lambda_i) \varphi_0^2) \Psi_{0,i} = 0 \quad (2.60)$$

bestimmt. Insbesondere ist $\lambda_0 = 0$, $\Psi_{0,0} = \phi_0$, und $\lambda_1 = 2$ mit zugehörigen $\Psi_{0,1}^{(k)} \propto \partial_{x_k} \varphi_0$, $k = 1, \dots, d$, entspricht den Translations-Nullmoden von \mathcal{M} . Da das Potential kugelsymmetrisch ist, sind die $\Psi_{0,i}$ zugleich Drehimpuls-eigenfunktionen und die λ_i sind entsprechend (in 3 Dimensionen $2l + 1$ - fach) entartet.

In nullter Ordnung hat (2.57) für jedes Paar $(\lambda_i, \Psi_{0,i})$ jeweils die vier Lösungen

$$f_{1,i} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \Psi_{l,i} \quad , \quad f_{2,i} = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \Psi_{r,i} \quad , \quad (2.61)$$

$$f_3 = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \phi_{l,0} \quad , \quad f_4 = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \phi_{r,0} \quad , \quad (2.62)$$

wobei $\Psi_{l/r,i}$ die um $\mp \frac{D}{2} \hat{e}_x$ verschobenen Lösungen $\Psi_{0,i}$ von (2.60) sind. $\phi_{l/r,0}$ unterscheiden sich nur durch die Normierung von den verschobenen Instantonlösungen $\varphi_{l/r,0}$. f_3 und f_4 sind aber keine Lösungen, wenn man Beiträge $O(\bar{\omega})$ berücksichtigt. In nullter Ordnung erkennt man das daran, daß in dieser Näherung das zugehörige Potential $\varphi^\top f_{3/4}$ (2.56) verschwindet. Die Moden f_3 und f_4 entsprechen Rotationen des Winkels θ (im linken und rechten Potentialtopf unabhängig voneinander). Der Winkel ist festgelegt, wenn man den Überlapp der beiden Potentialtöpfe berücksichtigt. Es bleibt also die erwartete zweifache Entartung jedes Eigenwertes von \mathcal{M} , wenn man die Kopplung

der beiden Potentialtöpfe völlig vernachlässigt.

Wir suchen die Nullmoden der 4×4 - Matrix des Operators $\Gamma - \lambda \varphi \varphi^\top$ im Unterraum der $f_1 \equiv f_{1,i}$, $f_2 \equiv f_{2,i}$, f_3 und f_4 für festgehaltenes i und eine feste Drehimpulskomponente von $\Psi_{0,i}$. Wir erwarten eine kleine Verschiebung des Eigenwertes: $\lambda = \lambda_i + \varepsilon$ mit $\varepsilon = O(\bar{\omega})$.⁹

Wir berechnen nun die Matrixelemente

$$\mathcal{O}_{mn} = \langle f_m | \Gamma - \lambda \varphi \varphi^\top | f_n \rangle \quad (2.63)$$

in erster Ordnung in $\bar{\omega}$. Es ist

$$\mathcal{O}_{11} = \int \Psi_{l,i} \left(-\Delta + 1 + \eta - (1 + \lambda) \varphi_l^2 \right) \Psi_{l,i} , \quad (2.64)$$

wobei wir $\tilde{\varphi}_l^2$ durch φ_l^2 ersetzt haben, denn $\varphi_l \delta \varphi_l$ ist ein Term zweiter Ordnung, siehe den Text nach Gl. (2.17)/(2.18). Der Klammerausdruck in (2.64) mit λ_i statt λ hat die Nullmode

$$\Psi_{0,i} \left(\sqrt{1 + \eta} \left(\mathbf{x} + \frac{D}{2} \hat{e}_x \right) \right) = \Psi_{l,i} + O(\eta) ,$$

wie man durch Reskalierung von (2.60) sieht (vergleiche die reskalierten Instantongleichungen (2.15)). Deshalb fallen in (2.64) die Beiträge linear in η heraus, übrig bleibt nur

$$\mathcal{O}_{11} = -\varepsilon \cdot \int \varphi_0^2 \Psi_{0,i}^2 . \quad (2.65)$$

Weiter ist

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{33} &= \int \phi_{l,0} \left(-\Delta + 1 - \eta - \varphi_l^2 \right) \phi_{l,0} \\ &= -2\eta + O(\bar{\omega}^2) \end{aligned} \quad (2.66)$$

und entsprechend folgt (bis auf Terme $O(\bar{\omega}^2)$)

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{22} &= \mathcal{O}_{11} \quad , \quad \mathcal{O}_{12} = 0 \quad , \\ \mathcal{O}_{44} &= -\mathcal{O}_{33} \quad , \quad \mathcal{O}_{34} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (2.67)$$

⁹ ε hat jetzt eine andere Bedeutung als in (2.57), wo der Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ gemeint ist.

Ferner finden wir

$$\begin{aligned}\mathcal{O}_{14} &= \int \Psi_{l,i} (-\Delta + 1 - (1 + \lambda)\varphi_l^2 - \varphi_r^2) \phi_{r,0} \\ &= -(1 + \lambda) \int \Psi_{l,i} \varphi_l^2 \phi_{r,0} ,\end{aligned}\quad (2.68)$$

$$\mathcal{O}_{13} = \int \Psi_{l,i} (t - \lambda \varphi_l (\varphi_r + \delta \varphi_r)) \phi_{l,0} . \quad (2.69)$$

Um den Term mit $\delta \varphi_r$ zu eliminieren, multiplizieren wir die Differentialgleichung (2.18) für $\delta \varphi_r$ mit $\Psi_{l,i}$,

$$\int \Psi_{l,i} (-\Delta + 1 - (1 + \lambda - \lambda)\varphi_l^2 - 3\varphi_r^2) \delta \varphi_r = \int \Psi_{l,i} (\varphi_l^2 \varphi_r - t \varphi_l) . \quad (2.70)$$

Auf der linken Seite der Gleichung wenden wir den Operator nach links an. Mit (2.60) ergibt das, wieder unter Vernachlässigung von Termen zweiter Ordnung,

$$\lambda \int \Psi_{l,i} \varphi_l^2 \delta \varphi_r = \int \Psi_{l,i} (\varphi_l^2 \varphi_r - t \varphi_l) . \quad (2.71)$$

Eingesetzt in (2.69) erhält man den Zusammenhang

$$\mathcal{O}_{13} = 2t \int \Psi_{l,i} \phi_{l,0} + \mathcal{O}_{14} . \quad (2.72)$$

Analog folgt

$$\mathcal{O}_{23} = -(1 + \lambda) \int \Psi_{r,i} \varphi_r^2 \phi_{l,0} \quad (2.73)$$

und

$$\mathcal{O}_{24} = 2t \int \Psi_{r,i} \phi_{r,0} + \mathcal{O}_{23} . \quad (2.74)$$

Die Matrixelemente \mathcal{O}_{mn} lassen sich also (in führender Ordnung) durch Überlappintegrale der 1-Instanton-Wellenfunktionen φ_0 und $\Psi_{0,i}$ ausdrücken.

Wir betrachten zunächst den Fall $\lambda_1 = 2$, d.h. die Nullmoden von \mathcal{M} .

2.3.2 Die Nullmoden von \mathcal{M}

Wir setzen

$$f_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \frac{1}{c} \partial_x \varphi_{l,0} , \quad f_2 = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \frac{1}{c} \partial_x \varphi_{r,0} , \quad (2.75)$$

$$c = \sqrt{\int (\partial_x \varphi_0)^2} = \sqrt{\frac{\int \varphi_0^2}{4-d}} = \frac{\|\varphi_0\|}{\sqrt{4-d}} . \quad (2.76)$$

Mit (2.72) – (2.74) erhalten wir sofort

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{13} = \mathcal{O}_{14} &\equiv -A \\ &= -\mathcal{O}_{23} = -\mathcal{O}_{24} . \end{aligned} \quad (2.77)$$

(Die Minuszeichen kommen daher, daß beim Vertauschen $l \leftrightarrow r$ (Spiegeln an der Ebene $x = 0$) $\partial_x \varphi_{l,0}$ in $-\partial_x \varphi_{r,0}$ übergeht.) In diesem Fall ist die Determinante der 4×4 - Matrix einfach das Produkt der Diagonalelemente, proportional zu $\varepsilon^2 \eta^2$. Es folgt also $\varepsilon = 0$ (in $O(\bar{\omega})$). Wir finden wie erwartet zwei Nullmoden, die der Translation in x -Richtung und der Abstandsänderung der Potentialtöpfe entsprechen:

$$f_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_1 + f_2) , \quad (2.78)$$

$$f_D = \frac{\eta}{\sqrt{2}\lambda_+} \left(f_1 - f_2 - \frac{A}{\eta} (f_3 - f_4) \right) . \quad (2.79)$$

Hierbei ist

$$A = -\mathcal{O}_{14} = \frac{\sqrt{4-d}}{\int \varphi_0^2} \int \varphi_{l,0}^3 \partial_x \varphi_{r,0} , \quad (2.80)$$

und

$$\lambda_{\pm} = \pm 2\sqrt{A^2 + \eta^2} \quad (2.81)$$

sind die beiden übrigen Eigenwerte der 4×4 - Matrix. In (2.80) ersetzen wir die partielle Ableitung nach x durch eine Ableitung nach D . Mit (2.19) und (2.20) folgt

$$-\frac{A}{\sqrt{4-d}} = \frac{dt}{dD} = -t (1 + O(1/D)) . \quad (2.82)$$

Der Anteil $f_3 - f_4$ von f_D ist eine Rotation des Mischungswinkels θ .

Für die Sattelpunktlösungen kennen wir bereits die Abhängigkeit des Winkels θ vom Abstand D . Mit $t = \bar{\omega} \sin 2\theta$ (2.12) folgt

$$\frac{dt}{dD} = 2\bar{\omega} \cos 2\theta \frac{d\theta}{dD} = 2\eta \frac{d\theta}{dD} . \quad (2.83)$$

Wegen der Schar von (Nahezu-)Sattelpunktlösungen, die wir mit D parametrisieren können, gibt es die Nullmode

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dD} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \partial_x \varphi_{l,0} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \partial_x \varphi_{r,0} + \frac{d\theta(D)}{dD} \frac{\partial}{\partial \theta} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} + O(\bar{\omega}) \\
&= \frac{\|\varphi_0\|}{2\sqrt{4-d}} \left(f_1 - f_2 - \frac{A}{\eta} (f_3 - f_4) \right) + O(\bar{\omega}) \\
&\propto f_D .
\end{aligned} \tag{2.84}$$

Die Mode (2.79) liefert also genau den erwarteten Zusammenhang von Abstandsänderung und θ -Rotation. Es gibt in (2.84) weitere Terme $O(\bar{\omega})$ von $d\eta/dD$.

Der Vollständigkeit halber geben wir auch die zu den beiden übrigen Eigenwerten λ_{\pm} der 4×4 - Matrix gehörigen Eigenfunktionen f_{\pm} an,

$$f_{\pm} \propto f_1 - f_2 + x_{\mp} f_3 - x_{\pm} f_4 , \tag{2.85}$$

mit

$$x_{\pm} = \frac{\eta}{A} \pm \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{A^2}} . \tag{2.86}$$

Dies sind die beiden ‘‘Nahezu-Nullmoden’’ von \mathcal{O}_x , siehe die Formeln (B.7), (B.8) in [6]. Man beachte, daß f_{\pm} keine Lösungen unserer Gleichungen (2.57) sind, sondern es ist $(\Gamma - 2\varphi\varphi^T) f_{\pm} = \lambda_{\pm} f_{\pm}$. Die echten Nullmoden von \mathcal{O}_x korrespondieren eins zu eins mit den Nullmoden von \mathcal{M} .

2.3.3 Die übrigen Eigenwerte von \mathcal{M}

Wir betrachten zunächst die Lösungen $\Psi_{0,i}$, λ_i mit Drehimpuls $l > 0$. Wegen der Kugelsymmetrie von φ_0 ist $\int \Psi_{0,i} \varphi_0 = 0$, also mit (2.72), (2.68)

$$\mathcal{O}_{13} = \mathcal{O}_{14} = -(1 + \lambda_i) \int \Psi_{l,i} \varphi_l^2 \phi_{r,0} \equiv -A . \tag{2.87}$$

Falls zusätzlich $\Psi_{0,i}$ zylindersymmetrisch bezüglich der x-Achse ist (d.h. Drehimpulskomponente $m_x = 0$ und damit im allgemeinen $A \neq 0$), dann erhält man dieselbe Struktur der 4×4 - Matrix \mathcal{O}_{mn} wie im letzten Abschnitt. Anstelle von (2.77) gilt

$$\mathcal{O}_{23} = \mathcal{O}_{24} = (-1)^l \mathcal{O}_{14} . \tag{2.88}$$

Der Eigenwert λ_i bleibt jeweils 2-fach entartet, die zugehörigen Lösungen Ψ_i lauten

$$f_{1,i} + (-1)^{l+1} f_{2,i} \quad (2.89)$$

und

$$f_{1,i} + (-1)^l f_{2,i} - \frac{A}{\eta} (f_3 - f_4) . \quad (2.90)$$

Falls $\Psi_{0,i}$ eine Drehimpulskomponente $m_x \neq 0$ bezüglich der x-Achse besitzt, dann verschwinden alle nichtdiagonalen Matrixelemente ($A = 0$) und es gibt, zumindest in $O(\bar{\omega})$, keine Kopplung zwischen den einzelnen Moden, d.h. (2.61) bleiben Lösungen, während die Moden (2.62) wegen $\mathcal{O}_{33} \neq 0$ keine Lösungen von (2.57) sind, wie wir bereits erwähnt haben.

Es bleibt der Fall $\int \Psi_{0,i} \varphi_0 \neq 0$: Dies gilt allgemein für kugelsymmetrische Lösungen $\Psi_{0,i}$, d.h. mit Drehimpuls $l = 0$.¹⁰ Es ist dann

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{13} &= \mathcal{O}_{24} = \mathcal{O}_{14} + 2t \int \Psi_{0,i} \phi_0 , \\ \mathcal{O}_{23} &= \mathcal{O}_{14} = -A . \end{aligned}$$

Setzen wir die Determinante von \mathcal{O}_{mn} gleich Null, so erhalten wir eine quadratische Gleichung für ε mit den Lösungen $\pm \varepsilon_i$,

$$\varepsilon_i = \frac{\mathcal{O}_{13}^2 - \mathcal{O}_{14}^2}{2\eta \cdot \int \varphi_0^2 \Psi_{0,i}^2} = O(t^2/\eta) = O(\bar{\omega}/\cos 2\theta) . \quad (2.91)$$

In diesem Fall tritt also eine Verschiebung der Eigenwerte λ_i auf. Wegen des paarweisen Auftretens von $\lambda_i + \varepsilon_i$ und $\lambda_i - \varepsilon_i$ ¹¹ liefert dies lediglich eine vernachlässigbare Korrektur $1 + O(\bar{\omega}^2)$ in $\det \mathcal{M}$.

In dem extrem kleinen Winkelbereich $|\cos 2\theta| \lesssim \bar{\omega}$ muß man auch die führenden $O(\bar{\omega}^2)$ - Beiträge in \mathcal{O}_{34} , \mathcal{O}_{33} und \mathcal{O}_{44} berücksichtigen. Die quadratische Gleichung für ε ergibt $\varepsilon_{1/2} = O(1)$. Es gibt aber weitere Beiträge von Korrekturen zweiter Ordnung, die wir nicht alle berechnet haben, d.h. wir können keine Aussage über die Eigenwerte machen, ihr Beitrag im Integral über θ bzw. D (siehe nächster Abschnitt) ist aber vernachlässigbar.

¹⁰Die Orthogonalität bezieht sich ja nur auf die Potentiale, $\int V_i V_0 = \int \Psi_{0,i} \varphi_0^3 = 0$ für $i > 0$.

¹¹Die Determinante ist invariant unter einer Vertauschung der beiden Potentialtöpfe entsprechend $\eta \rightarrow -\eta$, $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$.

Bemerkung:

Die Ψ_i geben bis auf einen Vorfaktor die zugehörige Änderung der Wellenfunktionen bei einer infinitesimalen Potentialänderung $\delta V = \zeta V_i$ an. In erster Ordnung Störungstheorie ist

$$\delta\varphi = -\frac{1}{\lambda_i} \zeta \Psi_i^\perp \quad (2.92)$$

mit $\Psi_i^\perp = \Psi_i - \frac{\int \varphi^\top \Psi_i}{\int \varphi^\top \varphi} \varphi$ dem Anteil von Ψ_i orthogonal zu φ .

2.3.4 Translationen und Rotationen

Die Translationen behandeln wir wie bei der Zustandsdichte, siehe (1.48). Es ist

$$\left\| \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{V}_{Sp} \right\| = \sqrt{2} \left\| \partial_x \varphi_0^2 \right\| . \quad (2.93)$$

Der Beitrag der Translationen lautet

$$\frac{|E|^{d/2}}{(\pi g)^{d/2}} \left\{ \sqrt{2} \left\| \partial_x \varphi_0^2 \right\| \right\}^d \int d^d z \dots , \quad (2.94)$$

wobei nun die um \mathbf{z} verschobenen Wellenfunktionen $\varphi_{1/2}$ einzusetzen sind. Die $d - 1$ Rotationsmoden liefern den Beitrag

$$\frac{|E|^{(d-1)/2}}{(\pi g)^{(d-1)/2}} \left\{ \sqrt{2} \left\| \partial_x \varphi_0^2 \right\| \right\}^{d-1} \left(\frac{D}{2} \right)^{d-1} S_d . \quad (2.95)$$

S_d ist die Oberfläche der Einheitskugel in d Dimensionen ($S_1 = 2, S_2 = 2\pi, S_3 = 4\pi$).

2.3.5 Die Nahezu-Nullmode

In führender Ordnung besitzt \mathcal{M} jeden der bereits beim Ein-Instanton-Problem auftretenden Eigenwerte doppelt. Der einzige Effekt, der in dieser Ordnung von der Kopplung der Potentialtöpfe übrigbleibt, ist die Kombination von Abstandsänderung und Rotation des Mischungswinkels. Wir ersetzen die Integration über diese nichttriviale "Nahezu-Nullmode" oder Quasi-Nullmode durch eine Integration über den Abstand D . Obwohl die Wirkung von D abhängt, behandeln wir diese Mode so, als wäre sie eine Nullmode, siehe hierzu Anhang D. Dies ist möglich, weil die Zusatzterme von dS/dD bei

der Berechnung der Sattelpunktsfluktuationen, die wir ja nur in führender Ordnung in $\bar{\omega}$ durchführen, vernachlässigbar sind. Die zugehörige Jacobi-Determinante ist

$$\left\| \frac{d}{dD} \tilde{V}_{Sp}(D, \theta(D)) \right\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \|\partial_x \varphi_0^2\| . \quad (2.96)$$

Der Beitrag der Nahezu-Nullmode ist folgendes Integral über D

$$\frac{|E|^{1/2}}{(\pi g)^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \|\partial_x \varphi_0^2\| \int_{D_0}^{\infty} dD \dots \quad (2.97)$$

Insgesamt erhalten wir also das Quadrat des Zustandsdichte-Beitrags. Im Ausdruck für die Leitfähigkeit steht noch

$$S_d \int_{D_0}^{\infty} dD D^{d-1} \int d^d x \int d^d z \mathbf{x}^2 \varphi_1(-\mathbf{z}) \varphi_2(-\mathbf{z}) \varphi_1(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \varphi_2(\mathbf{x} - \mathbf{z}) . \quad (2.98)$$

Im Produkt der vier Wellenfunktionen lautet der führende Term

$$\begin{aligned} & \varphi_1(-\mathbf{z}) \varphi_2(-\mathbf{z}) \varphi_1(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \varphi_2(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \\ &= \frac{\sin^2 2\theta}{4} (\varphi_l^2(-\mathbf{z}) - \varphi_r^2(-\mathbf{z})) (\varphi_l^2(\mathbf{x} - \mathbf{z}) - \varphi_r^2(\mathbf{x} - \mathbf{z})) \end{aligned} \quad (2.99)$$

Wir integrieren in (2.98) zuerst über \mathbf{x} und dann über \mathbf{z} . Das Resultat ist

$$-\frac{1}{2} \sin^2(2\theta) D^2 . \quad (2.100)$$

2.4 Resultate

Wir haben die Häufigkeit von Konfigurationen des Zufallspotentials mit zwei gebundenen Zuständen bei den Energien $E_{1/2} = -|E| \mp \frac{\omega}{2}$ und mit einem räumlichen Abstand $D|E|^{-1/2}$ zwischen den beiden Potentialminima berechnet. Die Wellenfunktionen sind in führender Ordnung in $\bar{\omega}$ die Linearkombination (2.10) der beiden Instantonlösungen mit dem Mischungswinkel $\theta = \theta(D, \bar{\omega})$. Wir setzen die Wellenfunktionen in die Formel (2.1), (2.2) für die Leitfähigkeit ein, berücksichtigen die Reskalierung $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}|E|^{-1/2}$ und nennen die Integrationsvariable $\tilde{\mathbf{x}}$ wieder \mathbf{x} ; es folgt:

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma(\omega, E) &= \frac{\pi e^2}{2d} \omega^2 n(E + \frac{\omega}{2}) n(E - \frac{\omega}{2}) |E|^{-d/2-1} \frac{S_d}{2} \\ &\times \int_{D_0}^{\infty} dD D^{d+1} \frac{\sin^2 2\theta(D)}{\cos 2\theta(D)} \exp(-\Delta S(D)/g) \end{aligned} \quad (2.101)$$

mit (siehe (2.34))

$$\Delta S(D) = S(D) - S(D \rightarrow \infty) = \alpha e^{-2D} D^{2-d} . \quad (2.102)$$

Im hydrodynamischen Limes, $\bar{\omega}^2/g \ll 1$, ist $\Delta S(D)$ vernachlässigbar und das Integral über den Abstand D in (2.101) mit (2.22) liefert den Wert

$$D_0^{d+1} \cdot (1 + O(1/D_0)) .$$

Mit (2.21) folgt

$$\text{Re } \sigma(\omega, E) = \frac{\pi e^2}{4d} S_d \omega^2 n^2(E) |E|^{-d/2-1} \ln^{d+1} \left(\frac{2c|E|}{\omega} \right) . \quad (2.103)$$

Daraus erhält man bei $T = 0$ die Leitfähigkeit

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega} \int_{E_F - \omega/2}^{E_F + \omega/2} dE \sigma(\omega, E) . \quad (2.104)$$

Im Limes “schwacher Unordnung”, $\bar{\omega}^2/g \gg 1$, tritt das Maximum im Exponenten $-2D - \Delta S(D)/g$ bei

$$D_2 \sim \frac{1}{2} |\ln g| - (d-2) \ln \left| \frac{1}{2} \ln g \right| + O(\ln \ln |\ln g|)$$

auf und man erhält, bis auf Faktoren $O(|\ln g|)$,

$$\text{Re } \sigma(\omega, E) \sim \frac{\pi e^2}{4d} S_d g n(E + \frac{\omega}{2}) n(E - \frac{\omega}{2}) |E|^{-d/2-1} . \quad (2.105)$$

Den Hauptbeitrag liefern in diesem Regime Potentialtöpfe mit dem Abstand $D_2 > D_0$.

In einer Dimension gilt $\Delta S(D) \equiv 0$ und wir erhalten im gesamten Bereich $\bar{\omega}, g \rightarrow 0$ das Resultat

$$\text{Re } \sigma(\omega, E) = \frac{\pi e^2}{2d} \omega^2 n(E + \frac{\omega}{2}) n(E - \frac{\omega}{2}) |E|^{-3/2} \ln^2 \left(\frac{8|E|}{\omega} \right) . \quad (2.106)$$

In [7] wird nicht berücksichtigt, daß die Sattelpunktswirkung im eindimensionalen Fall unabhängig vom Abstand ist ($\alpha = 0$ in (2.102) und dort in Formel (4.9), (4.10)).

Kapitel 3

Der hydrodynamische Limes

3.1 Entartete Störungstheorie

Die Gültigkeit der Sattelpunktsnäherung haben wir bisher damit begründet, daß für $\sqrt{g} \rightarrow 0$ nur eine kleine Umgebung von Potentialen einen Beitrag zum Funktionalintegral liefert, die Abweichung $\delta V(\mathbf{x})$ vom Sattelpunktpotential wurde als kleine Störung behandelt.

Im hydrodynamischen Limes, $\bar{\omega} \rightarrow 0$ bei festem g , ist aber die Amplitude \sqrt{g} der quadratischen Fluktuationen des Potentials groß gegenüber der Energieaufspaltung $2\bar{\omega}$ und man muß die Energieniveaus der beiden gebundenen Zustände des Potentials $V = V_{Sp} + \delta V$ mittels entarteter Störungstheorie berechnen. Im wesentlichen ändert sich dabei der Mischungswinkel θ .

Die Matrixelemente der Störung

$$V_{ij} = \langle \phi_i | \delta V | \phi_j \rangle \quad (3.1)$$

sind zum Teil nur von der Ordnung $\bar{\omega} \cdot \|\delta V\|$, man muss deshalb auch Beiträge zweiter Ordnung in δV berücksichtigen, d.h. wir ersetzen die Matrixelemente $V_{ij}, i, j \in \{1, 2\}$ in der entarteten Störungstheorie durch¹

$$\tilde{V}_{ij} = V_{ij} - \sum_{k>2} \frac{V_{ik}V_{kj}}{E_k^{(0)} + 1} (1 + O(\bar{\omega})) + O(\delta V^3). \quad (3.2)$$

¹siehe [25] §39, insbesondere den letzten Abschnitt. Im Nenner von (3.2) steht eigentlich $E_k^{(0)} - E$, wobei wir E in führender Ordnung in $\bar{\omega}$ durch $E_1^{(0)} \approx E_2^{(0)} \approx -1$ ersetzt haben.

Entartete Störungstheorie (Diagonalisierung der 2×2 - Matrix) liefert nun die Energieaufspaltung

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \sqrt{\left(\tilde{V}_{11} - \tilde{V}_{22} - 2\bar{\omega}\right)^2 + 4\left(\tilde{V}_{12}\right)^2} \quad (3.3)$$

Wir fordern wieder

$$\Delta E \stackrel{!}{=} 2\bar{\omega} , \quad (3.4)$$

d.h. sowohl \tilde{V}_{12} als auch $(\tilde{V}_{11} - \tilde{V}_{22})/2$ sind durch $2\bar{\omega}$ beschränkt. Die zweite Bedingung, $(E_1 + E_2)/2 = -1$, lautet

$$\tilde{V}_{11} + \tilde{V}_{22} = 0 . \quad (3.5)$$

Dies ist gerade die Summe der beiden Ausdrücke (2.46) gewöhnlicher Störungstheorie für E_1 und E_2 . Der Mischungswinkel ändert sich von dem Sattelpunktswert $\theta(D)$, den wir im folgenden θ_0 nennen wollen, auf $\theta = \theta[V_{Sp} + \delta V]$,

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{12} &= \bar{\omega} \sin(2\theta - 2\theta_0) , \\ \tilde{V}_{11} - \tilde{V}_{22} &= 2\bar{\omega} (1 - \cos(2\theta - 2\theta_0)) . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Ausgedrückt in der Basis $\{|l\rangle, |r\rangle\}$ der gebundenen Zustände der beiden einzelnen Töpfe lauten die Gleichungen

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{lr} &= -\bar{\omega} (\sin 2\theta - \sin 2\theta_0) , \\ \tilde{V}_{ll} - \tilde{V}_{rr} &= -2\bar{\omega} (\cos 2\theta - \cos 2\theta_0) , \\ \tilde{V}_{ll} + \tilde{V}_{rr} &= \tilde{V}_{11} + \tilde{V}_{22} = 0 . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Umrechnung der Matrixelemente ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{12} &= \frac{1}{2} \sin 2\theta_0 (\tilde{V}_{ll} - \tilde{V}_{rr}) - \cos 2\theta_0 \tilde{V}_{lr} , \\ \tilde{V}_{11} - \tilde{V}_{22} &= \cos 2\theta_0 (\tilde{V}_{ll} - \tilde{V}_{rr}) + 2 \sin 2\theta_0 \tilde{V}_{lr} . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Alternative Vorgehensweise: Man berechne die Korrekturen für die Bindungsenergien und Wellenfunktionen der beiden zunächst als isoliert betrachteten Potentialtöpfe durch die Störung δV . Anschließend bestimmt man das Tunnelmatrixelement und erhält als Beitrag der Störung δV (d.h. neben $\langle l|V_{Sp}|r\rangle = -t = -\bar{\omega} \sin 2\theta_0$) wieder \tilde{V}_{lr} gemäß (3.2), wobei die Terme zweiter Ordnung in δV nun von den Korrekturen erster Ordnung für die beiden gebundenen

Zustände $|l\rangle, |r\rangle$ stammen.

Wir wollen nun genauer untersuchen, in welchem Parameterbereich und für welche Werte von θ_0 die Sattelpunktmethode in der bisherigen Form gültig bleibt.

Da orthogonal zu der Quasi-Nullmode, d.h. bei festgehaltenem Abstand D bzw. Winkel $\theta_0(D)$, nur kleine Potentialdeformationen von $O(\sqrt{g})$ einen Beitrag liefern, besteht bei den zugehörigen Wellenfunktionen in führender Ordnung in \sqrt{g} die einzige Änderung im Mischungswinkel $\theta[V]$. Wir werden sehen, daß für exponentiell kleine Werte von $\bar{\omega}$ diese Änderung von θ groß werden kann. In der Umgebung von V_{Sp} dominieren dann Terme höherer Ordnung. Außerdem darf man dann den Vorfaktor $\sin^2 2\theta$ im Funktionalintegral nicht mehr durch $\sin^2 2\theta_0$ ersetzen, sondern es ist explizit über $\theta[V]$ zu integrieren.

3.2 Der Bereich kleiner Winkelfluktuationen ($\cos 2\theta_0 \gg g^{1/2} D^s$)

In Kapitel 2 haben wir nur die Bedingung benutzt, daß die Summe der beiden Bindungsenergien vorgegeben ist. Dadurch wurde der Koeffizient a_1 der Mode $V_1 \propto V_{Sp} = -\varphi_1^2 - \varphi_2^2$ festgelegt. Die zweite Nebenbedingung (die Differenz der Bindungsenergien ist ebenfalls vorgegeben) legt entsprechend den Koeffizienten a_2 der Mode V_2 fest. Wie bereits in Kap. 2.3 erwähnt, ist V_2 die zu V_1 orthogonale Linearkombination von φ_1^2 und φ_2^2 :

$$V_2 = \frac{1}{N_2} [\cos 2\theta_0 (\phi_l^2 - \phi_r^2) + 2 \sin 2\theta_0 \phi_l \phi_r - O(\bar{\omega})(\phi_l^2 + \phi_r^2)] \quad . \quad (3.9)$$

Solange $a_2 \propto a_i^2 \propto g$ gilt, ist der Beitrag von a_2 in der Wirkung vernachlässigbar, denn a_2 tritt im Gegensatz zu a_1 nicht linear, sondern nur quadratisch auf.

Wir wollen zunächst den sehr kleinen Parameterbereich $|\cos 2\theta_0| \lesssim \bar{\omega}$ ausschließen, in dem sich φ_1^2 und φ_2^2 nur durch Terme $O(\bar{\omega})$ unterscheiden. Für $\cos 2\theta_0 \gg \bar{\omega}$ liefert, bis auf Korrekturen $O(\frac{\bar{\omega}}{\cos 2\theta_0})$, nur V_2 einen linearen Beitrag zu $\tilde{V}_{ll} - \tilde{V}_{rr}$, denn die Moden $V_i, i > 2$ liefern wegen der Orthogonalität

zu V_1 und V_2 keinen linearen Beitrag zu $\tilde{V}_{11} - \tilde{V}_{22}$ und deshalb nur einen sehr kleinen Beitrag ($-\frac{2\sin 2\theta_0}{\cos 2\theta_0} a_i \langle l|V_i|r\rangle$) zu $\tilde{V}_{ll} - \tilde{V}_{rr}$.

Das Tunnelmatrixelement wird in linearer Ordnung nur durch Potentialdeformationen proportional zu

$$V_3 = \frac{1}{N_3} \phi_l \phi_r \quad (3.10)$$

geändert. Für $\delta V = a_3 V_3$ ist

$$\langle l|\delta V|r\rangle = a_3 N_3 \propto a_3 D^s t, \quad (3.11)$$

siehe (2.33), D^s haben wir wie in [7] definiert: $s = (3 - d)/4$ für $d < 3$, $s = 0$ für $d > 3$ und $D^s \equiv |\ln D|^{1/2}$ für $d = 3$. Wir betrachten hier den Fall

$$\sqrt{g} D^s \ll 1. \quad (3.12)$$

Die relative Änderung des Tunnelmatrixelements bzw. von $\sin 2\theta$ gemäß der ersten Zeile von (3.7) ist also klein in der Umgebung des Sattelpunktes ($a_3 \sim \sqrt{g}$),

$$\sin 2\theta - \sin 2\theta_0 \propto -\sin 2\theta_0 a_3 D^s. \quad (3.13)$$

Allerdings darf das Tunnelmatrixelement nicht größer als $\bar{\omega}$ werden, damit (3.4) erfüllt ist. Falls also $\sin 2\theta_0$ zu nahe bei 1 ist, d.h. falls $|1 - \sin 2\theta_0| \leq \text{const} \sqrt{g} D^s$, wird die Deformation proportional zu $-V_3$, die die Tunnelbarriere weiter absenkt, durch einen Term höherer Ordnung unterdrückt. Die zugehörige Änderung des Mischungswinkels lautet

$$\delta\theta = -\frac{a_3 N_3}{2\bar{\omega} \cos 2\theta_0} \propto -\frac{\sin 2\theta_0}{2 \cos 2\theta_0} a_3 D^s, \quad (3.14)$$

dies gilt aber nur für

$$\cos 2\theta_0 \gg \sqrt{g} D^s. \quad (3.15)$$

3.3 Der Bereich starker Winkelfluktuationen

Wir kommen nun zu dem Bereich exponentiell kleiner Frequenzen, für die $\sqrt{g} D^s \gtrsim 1$. Um die Potentiale mit anderen Werten von θ als $\theta_0(D)$ korrekt zu berücksichtigen, führen wir die zusätzliche Nebenbedingung

$$\theta[V] = \theta \quad (3.16)$$

ein und bestimmen das Sattelpunktpotential $V_{Sp}(D, \theta)$ unter dieser Nebenbedingung. Die Variationsgleichung lautet nun

$$V_{Sp}(\mathbf{x}) = -\rho_1\varphi_1^2 - \rho_2\varphi_2^2 + \rho_3V_3 , \quad (3.17)$$

wobei $\varphi_{1/2}$ wieder die Schrödingergleichungen

$$\left(-\Delta + 1 \pm \bar{\omega} + V_{Sp} \right) \varphi_{1/2}(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.18)$$

erfüllen und $\rho_{1/2} = 1 + \Delta\rho_{1/2}$ mit $\Delta\rho_{1/2} \propto \rho_3$. Man findet einen Zusatzterm $\propto \rho_3^2 \propto (\sin 2\theta - \sin 2\theta_0)^2$ zur Sattelpunktwirkung $S(D)$ gemäß Formel (3.28) von [7]. Die genaue Form des Zusatzterms ist etwas kompliziert wegen der Rückwirkung auf $\varphi_{1/2}$. Die Integration über θ und D ist in [7] ausgeführt, siehe dort die Formeln (4.1), (4.5), (4.7), und liefert erstaunlicherweise den Faktor Eins, d.h. denselben Ausdruck wie im Bereich schwacher Winkelfluktuationen.

Kapitel 4

Zusammenfassung

Starke Unordnung führt zur Lokalisation von Elektronen. In dieser Arbeit wurde die Zustandsdichte und die dynamische Leitfähigkeit nichtwechselwirkender Elektronen tief im lokalisierten Bereich, d.h. für Energien E weit unterhalb der Bandkante des geordneten Systems, untersucht. In diesem Regime dominieren seltene Potentialkonfigurationen, tiefe “Löcher” in der Potentiallandschaft, mit gebundenen Zuständen der Energie E . Diese Physik kann systematisch im Instantonbild untersucht werden, qualitativ und quantitativ.

Der Ausgangspunkt dieser Arbeit war das Resultat der eindimensionalen, supersymmetrischen Rechnung von Hayn und John [6] zur frequenzabhängigen Leitfähigkeit im Limes “schwacher Unordnung”, welches der Arbeit von Houghton, Schäfer und Wegner [7] widerspricht, die auf der Analyse “optimaler Fluktuationen” des Unordnungspotentials basiert.

Es gelang, die supersymmetrische Rechnung [6] von einer auf zwei und drei Dimensionen zu verallgemeinern. Dabei kann man nicht mehr auf die nur in einer Dimension bekannte exakte Lösung der Sattelpunktgleichungen zurückgreifen. Es stellt sich aber heraus, daß die mit einem geeigneten Ansatz gefundene näherungsweise Lösung ausreicht, um die Sattelpunktwirkung sowie den Beitrag der quadratischen Fluktuationen zu berechnen. Die Resultate stimmen für Dimensionen größer als Eins mit [7] überein. Die Diskrepanz zwischen den Resultaten von [6] und [7] im eindimensionalen Fall konnte aufgeklärt werden.

Wir bestätigen die Vorgehensweise von [7] und können ihre Herleitung ver-

einfachen.

Die Äquivalenz der Resultate der beiden Vorgehensweisen, der Variationsmethode von [8] und der supersymmetrischen Rechnung wird gezeigt. Dabei ist der Gültigkeitsbereich der letzteren auf den Limes “schwacher Unordnung” beschränkt, deshalb haben wir hauptsächlich die Variationsmethode beschrieben, deren Sattelpunkte auch direkt interpretiert werden können als wahrscheinlichste Realisierungen des Zufallspotentials, die gewisse Nebenbedingungen erfüllen, d.h. einen Beitrag zur Zustandsdichte bzw. zur Leitfähigkeit liefern bei vorgegebener Energie oder Frequenz.

In einer Dimension gilt die Mott-Formel $\sigma(\omega) \sim n^2 \omega^2 \ln^2(\omega)$ sogar im gesamten Bereich kleiner Frequenzen und tief lokalisierter Zustände, bei der Frequenzabhängigkeit ist aber die Energieabhängigkeit der Zustandsdichtefaktoren, d. h. im wesentlichen $n(E_F + \omega)$, zu berücksichtigen.

Anhang A

Die quadratischen Fluktuationen: Äquivalenz zur Supersymmetrie

A.1 Weißes Rauschen

Die Determinante $\det \mathcal{M}$ der quadratischen Fluktuationen des Zufallspotentials um die Sattelpunktlösung, wobei die Energie des gebundenen Zustandes unverändert bleiben soll, läßt sich als Quotient zweier Determinanten ausdrücken, wie er als Beitrag der Sattelpunktsfluktuationen bei der Supersymmetrie- bzw. der Replika-Methode auftritt. Wir folgen in diesem Abschnitt dem Anhang der Arbeit von Houghton und Schäfer [8].

Im Unterraum orthogonal zu $\tilde{V}_0 \propto \varphi_0^2$, in dem die Determinante von \mathcal{M} zu berechnen ist, können wir \mathcal{M} durch den regularisierten Operator ($\varepsilon \rightarrow 0$)

$$\mathcal{M}_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - 2 \varphi_0(\mathbf{x}) \Gamma_\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_0(\mathbf{x}') \quad (\text{A.1})$$

ersetzen, mit

$$\Gamma_\varepsilon = -\Delta + 1 - (1 + \varepsilon) \varphi_0^2. \quad (\text{A.2})$$

Die Determinante von \mathcal{M}_ε schreiben wir als

$$\det \mathcal{M}_\varepsilon = \det(\Gamma_\varepsilon - 2 \varphi_0^2) / \det \Gamma_\varepsilon. \quad (\text{A.3})$$

Die Sattelpunktsgleichung (1.17) lautet $\Gamma \varphi_0 = 0$, mit $\Gamma = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Gamma_\varepsilon$. Wegen

$$\Gamma_\varepsilon \varphi_0 = -\varepsilon \varphi_0^3, \quad (\text{A.4})$$

also $\Gamma_\varepsilon^{-1}\varphi_0^3 = -\frac{1}{\varepsilon}\varphi_0$, folgt

$$\mathcal{M}_\varepsilon\varphi_0^2 = \left(1 + \frac{2}{\varepsilon}\right)\varphi_0^2 \equiv e_0\varphi_0^2. \quad (\text{A.5})$$

Analog folgt aus $\frac{\partial}{\partial x_i}$ (A.4)

$$\mathcal{M}_\varepsilon\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi_0^2 = -\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi_0^2 \equiv e_1\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi_0^2. \quad (\text{A.6})$$

Auf der rechten Seite von (A.3) ist entsprechend φ_0 näherungsweise eine Eigenfunktion von Γ_ε mit dem Eigenwert

$$\hat{e}_0 = \frac{\langle\varphi_0|-\varepsilon\varphi_0^2|\varphi_0\rangle}{\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle} = -\varepsilon\left(\frac{\|\varphi_0^2\|}{\|\varphi_0\|}\right)^2. \quad (\text{A.7})$$

$\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi_0 \equiv \partial_{x_i}\varphi_0$, $i = 1, \dots, d$, sind näherungsweise Eigenfunktionen von $\Gamma_\varepsilon - 2\varphi_0^2$ mit dem Eigenwert

$$\hat{e}_1 = \frac{\langle\partial_{x_i}\varphi_0|-\varepsilon\varphi_0^2|\partial_{x_i}\varphi_0\rangle}{\langle\partial_{x_i}\varphi_0|\partial_{x_i}\varphi_0\rangle} = -\frac{\varepsilon}{4}\left(\frac{\|\partial_{x_i}\varphi_0^2\|}{\|\partial_{x_i}\varphi_0\|}\right)^2. \quad (\text{A.8})$$

Wir dividieren diese Moden auf beiden Seiten von (A.3) heraus und kennzeichnen die ohne die Nullmoden berechneten Determinanten mit einem Strich. Die gesuchte Determinante von \mathcal{M} im Unterraum orthogonal zu φ_0^2 erhalten wir, indem wir zusätzlich den für $\varepsilon \rightarrow 0$ divergierenden Eigenwert von \mathcal{M}_ε herausdividieren, also

$$\begin{aligned} \det'\mathcal{M} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\det\mathcal{M}_\varepsilon}{e_1^d e_0} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{e}_1^d}{\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)^d \left(1 + \frac{2}{\varepsilon}\right)\hat{e}_0} \frac{\det'(\Gamma_\varepsilon - 2\varphi_0^2)}{\det'\Gamma_\varepsilon} \\ &= -J^2 \cdot \frac{\det'(\Gamma - 2\varphi_0^2)}{\det'\Gamma} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

($\Gamma - 2\varphi_0^2$ besitzt einen negativen Eigenwert; $\det'\mathcal{M}$ ist natürlich positiv). Der Quotient ist zugleich der Beitrag der quadratischen Fluktuationen um den supersymmetrischen Sattelpunkt. Der Faktor

$$J = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\|\partial_{x_i}\varphi_0^2\|}{\|\partial_{x_i}\varphi_0\|}\right)^d \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\|\varphi_0\|}{\|\varphi_0^2\|} \quad (\text{A.10})$$

kompensiert die unterschiedlichen Jacobi-Determinanten, siehe (1.49).

A.2 Endliche Korrelationslänge

Wir verallgemeinern die Rechnung des letzten Abschnitts auf Unordnung mit einer allgemeinen Korrelationsfunktion $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. \mathcal{M} (1.67) ersetzen wir wieder durch

$$\mathcal{M}_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = W^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - 2 \psi_{Sp}(\mathbf{x}) \Gamma_\varepsilon^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') , \quad (\text{A.11})$$

mit

$$\Gamma_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (-\Delta + |E| + V_{Sp}(\mathbf{x})) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \varepsilon \psi_{Sp}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') , \quad (\text{A.12})$$

wobei V_{Sp} und ψ_{Sp} durch die Sattelpunktgleichung (1.56) oder

$$\int d^d x' \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') = 0 \quad (\text{A.13})$$

gegeben sind. Die Determinante von $\mathcal{M}_\varepsilon W$ können wir analog zu (A.3) als Quotienten schreiben,

$$\det(\mathcal{M}_\varepsilon W) = \det(\Gamma_\varepsilon - 2 \psi_{Sp} W \psi_{Sp}) / \det \Gamma_\varepsilon . \quad (\text{A.14})$$

Wir leiten die Sattelpunktgleichung (A.13) nach x_i ab,

$$\int d^d x' \left(\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - 2 \psi_{Sp}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') \right) \frac{\partial \psi_{Sp}(\mathbf{x}')}{\partial x'_i} = 0 . \quad (\text{A.15})$$

Die für $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindenden Eigenwerte von Γ_ε bzw. von $\Gamma_\varepsilon - 2 \psi_{Sp} W \psi_{Sp}$ lauten damit (in führender Ordnung in ε)

$$\hat{e}_0 = -\varepsilon \frac{\langle \psi_{Sp} | \psi_{Sp} W \psi_{Sp} | \psi_{Sp} \rangle}{\langle \psi_{Sp} | \psi_{Sp} \rangle} \quad (\text{A.16})$$

bzw.

$$\hat{e}_1 = -\varepsilon \frac{\langle \partial_{x_i} \psi_{Sp} | \psi_{Sp} W \psi_{Sp} | \partial_{x_i} \psi_{Sp} \rangle}{\langle \partial_{x_i} \psi_{Sp} | \partial_{x_i} \psi_{Sp} \rangle} . \quad (\text{A.17})$$

Die Eigenwerte von $\mathcal{M}_\varepsilon W$ sind bestimmt durch die Lösungen λ_i, Ψ_i der Gleichung

$$\int d^d x' \left(\Gamma_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - (\lambda_i - \varepsilon) \psi_{Sp}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') \right) \Psi_i(\mathbf{x}') = 0 . \quad (\text{A.18})$$

Wir wenden hierauf den Operator $\psi_{Sp}\Gamma_\varepsilon^{-1}$ an, es folgt dann nach einer kleinen Umformung (vergleiche die Berechnung der Determinante im Leitfähigkeits-Kapitel)

$$(\mathcal{M}_\varepsilon W) \psi_{Sp} \Psi_i = \left(1 - \frac{2}{\lambda_i - \varepsilon}\right) \psi_{Sp} \Psi_i . \quad (\text{A.19})$$

Gl. (A.15) liefert $\lambda_1 = 2$, d.h.

$$(\mathcal{M}_\varepsilon W) \psi_{Sp} \partial_{x_i} \psi_{Sp} \approx -\frac{\varepsilon}{2} \psi_{Sp} \partial_{x_i} \psi_{Sp} . \quad (\text{A.20})$$

Der für $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindende, d -fach entartete ($i = 1, \dots, d$) Eigenwert von \mathcal{M}_ε lautet deshalb in führender Ordnung in¹ ε

$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{\langle \psi_{Sp} \partial_{x_i} \psi_{Sp} W | \mathcal{M}_\varepsilon | W \psi_{Sp} \partial_{x_i} \psi_{Sp} \rangle}{\frac{1}{4} \int (\partial_{x_i} V_{Sp})^2} \\ &= -2\varepsilon \frac{\langle \partial_{x_i} \psi_{Sp} | \psi_{Sp} W \psi_{Sp} | \partial_{x_i} \psi_{Sp} \rangle}{\|\partial_{x_i} V_{Sp}\|^2} . \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Die Sattelpunktgleichung entspricht $\lambda_0 = 0$, $\Psi_0 = \psi_{Sp}$, also mit (A.19)

$$\mathcal{M}_\varepsilon W \psi_{Sp}^2 = \left(1 + \frac{2}{\varepsilon}\right) \psi_{Sp}^2 \quad (\text{A.22})$$

oder

$$\mathcal{M}_\varepsilon^{-1} \psi_{Sp}^2 \approx \frac{\varepsilon}{2} W \psi_{Sp}^2 . \quad (\text{A.23})$$

$\mathcal{M}_\varepsilon^{-1}$ besitzt also den Eigenwert

$$e_0^{-1} = \frac{\langle \psi_{Sp}^2 | \mathcal{M}_\varepsilon^{-1} | \psi_{Sp}^2 \rangle}{\langle \psi_{Sp}^2 | \psi_{Sp}^2 \rangle} = \frac{\varepsilon \langle \psi_{Sp}^2 | W | \psi_{Sp}^2 \rangle}{2 \|\psi_{Sp}^2\|^2} . \quad (\text{A.24})$$

Insgesamt erhalten wir

$$\begin{aligned} \det' \mathcal{M} \cdot \det W &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\det \mathcal{M}_\varepsilon}{e_1^d e_0} \cdot \det W \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{e}_1^d}{e_1^d e_0 \hat{e}_0} \cdot \frac{\det'(\Gamma_\varepsilon - 2 \psi_{Sp} W \psi_{Sp})}{\det' \Gamma_\varepsilon} \\ &= -J^2 \cdot \frac{\det'(\Gamma - 2 \psi_{Sp} W \psi_{Sp})}{\det' \Gamma} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

¹Im Nenner verwenden wir, wie auch schon bei (A.15),

$$\begin{aligned} \int d^d x' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_i} \psi_{Sp}(\mathbf{x}') &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int d^d x' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}')^2 \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} V_{Sp}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

mit

$$J = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\|\partial_{x_i} V_{Sp}\|}{\|\partial_{x_i} \psi_{Sp}\|} \right)^d \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\|\psi_{Sp}\|}{\|\psi_{Sp}^2\|}. \quad (\text{A.26})$$

A.3 Der Übergang zum weißen Rauschen

Im Limes Korrelationslänge $L \rightarrow 0$, d.h. $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mapsto \gamma \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, geht in unserer Konvention $\mathcal{M}_\varepsilon W$ in den Operator \mathcal{M}_ε (A.1) für das weiße Rauschen über. Ferner ist $V_{Sp}(\mathbf{x}) = -\int d^d x' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}') \mapsto -\gamma \psi_{Sp}^2(\mathbf{x})$, daraus ergibt sich

$$\det' \mathcal{M} \cdot \det W = \gamma^{d+1} \det' \mathcal{M} W, \quad (\text{A.27})$$

wobei

$$\det' \mathcal{M} W = \prod_{i>d} \left(1 - \frac{2}{\lambda_i}\right), \quad (\text{A.28})$$

mit λ_i gemäß (A.18). Dieses Produkt ist dimensionslos im Gegensatz zur linken Seite von (A.25).

Anhang B

Zur Berechnung der Fluktuationsdeterminanten

Die Determinante von $\mathcal{M}W$ im Unterraum orthogonal zu den Nullmoden und der “verbotenen Mode” lautet, wie wir bereits in (A.19) gesehen haben,

$$\det' \mathcal{M}W = \prod_{i>d} \left(1 - \frac{2}{\lambda_i}\right), \quad (\text{B.1})$$

mit λ_i gemäß (A.18), d.h.

$$\int d^d x' \left[(-\Delta + |E| + V_{Sp}(\mathbf{x})) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \lambda_i \psi_{Sp}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}(\mathbf{x}') \right] \Psi_i(\mathbf{x}') = 0, \quad (\text{B.2})$$

wobei das Produkt ohne die (bereits bestimmten) Lösungen $\lambda_0 = 0$ und $\lambda_1 = \dots = \lambda_d = 2$ gebildet wird.

B.1 Weißes Rauschen in drei Dimensionen

Für weißes Rauschen, $W(\mathbf{x}) = \gamma \delta(\mathbf{x})$, geht (B.2) über in

$$\left(-\Delta + |E| + (1 + \lambda_i) V_{Sp} \right) \Psi_i = 0. \quad (\text{B.3})$$

Im folgenden wollen wir nur den dreidimensionalen Fall betrachten. Die numerisch bestimmten λ_i (mit $1 + \lambda_i \leq 60$) sind in Tabelle 1 von [1] angegeben. Das asymptotische Verhalten der λ_i für $i \rightarrow \infty$ erhält man über die Anzahl der gebundenen Zustände bis zur Energie $-|E|$ in einem sehr tiefen Potential

λV_{Sp} mit $\lambda \rightarrow \infty$: In semiklassischer Näherung (Thomas-Fermi-Näherung) beträgt die lokale Dichte $\frac{1}{6\pi^2} (E - \lambda V_{Sp}(\mathbf{x}))^{3/2}$, das sind also insgesamt

$$N(\lambda) = \frac{1}{6\pi^2} \int d^3x |\lambda V_{Sp}(\mathbf{x})|^{3/2} + O(\lambda^{1/2}) \quad (\text{B.4})$$

Zustände. Die asymptotische Dichte der λ_i (einschließlich der Entartungen gezählt) ist nun

$$\rho(\lambda) = \frac{dN(\lambda)}{d\lambda} \propto \lambda^{1/2}, \quad (\text{B.5})$$

also gilt in guter Näherung, wenn man die λ_i bis zu einem gewissen $\bar{\lambda}$ numerisch bestimmt hat,

$$\ln \det'(\mathcal{M}W) \approx \sum_{2 < \lambda_i < \bar{\lambda}} \ln\left(1 - \frac{2}{\lambda_i}\right) + \int_{\bar{\lambda}}^{\infty} d\lambda \rho(\lambda + 1) \ln\left(1 - \frac{2}{\lambda}\right). \quad (\text{B.6})$$

Allerdings divergiert das Integral für große λ wie $-\Lambda^{1/2}$, wenn Λ der Cutoff für die λ -Integration ist, d.h. $\sum_i 1/\lambda_i$ divergiert, wogegen $\sum_i 1/\lambda_i^2$ endlich ist. Zur Behandlung dieser Divergenz betrachten wir Unordnung mit einer kleinen, aber endlichen Korrelationslänge.

B.2 Asymptotisches Verhalten für verschwindende Korrelationslänge in drei Dimensionen

Um den für $L \rightarrow 0$ divergierenden Anteil aus dem Vorfaktor $(\det' \mathcal{M}W)^{-1/2}$ herauszuziehen, definieren wir den renormierten Ausdruck

$$\det'_{Ren} \mathcal{M}W \equiv \prod_{i>d} \left(1 - \frac{2}{\lambda_i}\right) \exp \sum_i \frac{2}{\tilde{\lambda}_i} \quad (\text{B.7})$$

wobei $\sum_{i>d} (1/\tilde{\lambda}_i - 1/\lambda_i)$ für $L \rightarrow 0$ endlich bleiben soll. Die $\tilde{\lambda}_i$ seien durch

$$\int d^3x' \left[(-\Delta + |E|) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \tilde{\lambda}_i W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}') \right] \tilde{\Psi}_i(\mathbf{x}') = 0 \quad (\text{B.8})$$

gegeben anstelle der Gleichung (B.2) für λ_i . Damit läßt sich der Zusatzterm $\exp(\sum_i 2/\tilde{\lambda}_i)$ leicht berechnen, wie wir gleich sehen werden. Für festes i und $L \rightarrow 0$ geht (B.8) ebenso wie (B.2) in Gleichung (B.3) über, mit $\tilde{\lambda}_i \mapsto \lambda_i + 1$.

Mit dieser Definition können wir den in [1] numerisch bestimmten Vorfaktor übernehmen, siehe nächster Abschnitt. Mit (B.8) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\sum_i \frac{1}{\tilde{\lambda}_i} &= \text{Tr} \left((-\Delta_x + |E|)^{-1} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}') \right) \\
&= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\widetilde{W}(\mathbf{k})}{\mathbf{k}^2 + |E|} \int d^3 x \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}) \\
&\equiv Q \cdot \int d^3 x \psi_{Sp}^2(\mathbf{x}) , \tag{B.9}
\end{aligned}$$

wobei $\widetilde{W}(\mathbf{k})$ die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ist,

$$\widetilde{W}(\mathbf{k}) = \int d^3 x e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} W(\mathbf{x}) . \tag{B.10}$$

Für die Gaußsche Korrelationsfunktion (1.59) ist also

$$\widetilde{W}(\mathbf{k}) = \gamma \exp(-k^2 L^2 / 4) \tag{B.11}$$

und für $L \ll |E|^{-1/2}$ folgt

$$Q = \frac{\gamma}{2\pi^{3/2} L} \left(1 + O(L|E|^{1/2}) \right) . \tag{B.12}$$

B.3 Berechnung der Determinanten bei Brezin/Parisi

Zur Berechnung des Quotienten der Determinanten (A.9) bzw. (A.25) wird in [1],[3] Zähler und Nenner mit $(-\Delta + 1)^{-1}$ bzw. $(-\Delta + |E|)^{-1}$ multipliziert. Im Falle des weißen Rauschens in drei Dimensionen, welcher in [1] behandelt wird, divergieren Zähler und Nenner und müssen beide renormiert werden. Der dort abgeleitete Ausdruck ist (ohne den Beitrag der Nullmoden) der $(L \rightarrow 0)$ -Limes von

$$\frac{\prod_{i>d} (1 - 3/(\lambda_i + 1)) \exp \sum_i 3/\tilde{\lambda}_i}{\prod_{i>d} (1 - 1/(\lambda_i + 1)) \exp \sum_i 1/\tilde{\lambda}_i} ,$$

mit $\lambda_i, \tilde{\lambda}_i$ gemäß (B.3), (B.8), welches mit unserem Ausdruck (B.7) übereinstimmt.

Anhang C

Eigenschaften der Instantonlösung

Die Instantongleichung (1.17)

$$\left(-\Delta + 1 - \varphi_0^2(\mathbf{x}) \right) \varphi_0(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{C.1})$$

folgt als Variationsgleichung aus der “Wirkung” $S[\varphi]$,

$$S[\varphi] = \int d^d x \left\{ (\nabla \varphi)^2 + \varphi^2 - \frac{1}{2} \varphi^4 \right\} . \quad (\text{C.2})$$

Aus (C.1) erhalten wir für die (normierbare) Lösung $\varphi_0(\mathbf{x})$ durch Multiplikation mit φ_0 und Integration die Bedingung

$$\int d^d x \left\{ (\nabla \varphi_0)^2 + \varphi_0^2 - \varphi_0^4 \right\} = 0 \quad (\text{C.3})$$

oder

$$S[\varphi_0] = \frac{1}{2} \int d^d x \varphi_0^4(\mathbf{x}) . \quad (\text{C.4})$$

Ferner ist

$$S[\varphi(\lambda \mathbf{x})] = \int d^d x \left\{ \lambda^{2-d} (\nabla \varphi)^2 + \lambda^{-d} (\varphi^2 - \frac{1}{2} \varphi^4) \right\} , \quad (\text{C.5})$$

und da die Wirkung bei $\varphi = \varphi_0$ insbesondere invariant unter einer infinitesimalen Skalentransformation ist, $\frac{d}{d\lambda} S[\varphi_0(\lambda \mathbf{x})] \Big|_{\lambda=1} = 0$,¹ d.h.

$$(2-d) \int d^d x (\nabla \varphi_0)^2 - d \int d^d x (\varphi_0^2 - \frac{1}{2} \varphi_0^4) = 0 , \quad (\text{C.6})$$

¹Diese Überlegung für allgemeines Potential $V[\varphi]$ findet man z.B. in [21], [19].

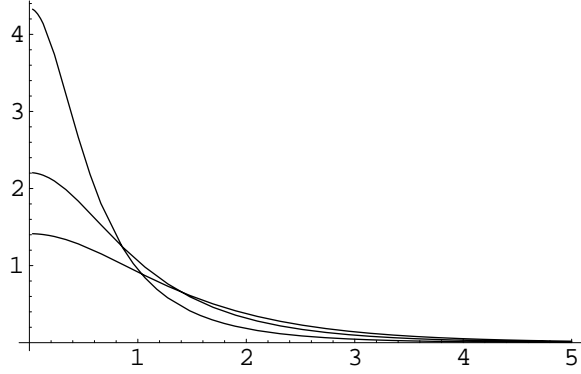


Abbildung C.1: $\varphi_0(r)$ für $d = 1, 2, 3$.

folgt zusammen mit (C.3)

$$\int d^d x \varphi_0^4 = \frac{4}{4-d} \int d^d x \varphi_0^2, \quad (\text{C.7})$$

$$\int d^d x (\nabla \varphi_0)^2 = \frac{d}{4-d} \int d^d x \varphi_0^2. \quad (\text{C.8})$$

Die Wirkung $S[\varphi_0]$ divergiert also für $d = 4$, lokalisierte Lösungen mit endlicher Wirkung gibt es somit nur für $d < 4$. Abb. C.1 zeigt das kugelsymmetrische $\varphi_0(r)$, also Lösung von

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d-1}{r} \frac{d}{dr} + 1 - \varphi_0^2(r) \right) \varphi_0(r) = 0 \quad (\text{C.9})$$

für $d = 1, 2, 3$. In einer Dimension ist $\varphi_0(x) = \sqrt{2}/\cosh(x)$ und man erhält

$$\|\varphi_0\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_0^2(x) = 4, \quad \|\varphi_0^2\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_0^4(x) = 16/3. \quad (\text{C.10})$$

In zwei und drei Dimensionen lautet das Maximum von $\varphi_0(r)$:

$$\varphi_0(0) = 2.2062 \quad \text{bzw.} \quad \varphi_0(0) = 4.3374.$$

Für die Wirkung findet man (siehe [1], Tabelle II):

$$\int d^2 x \varphi_0^4(\mathbf{x}) = 23.40179 \quad \text{bzw.} \quad \int d^3 x \varphi_0^4(\mathbf{x}) = 75.589005. \quad (\text{C.11})$$

Anhang D

Integration längs eines Tales

D.1 Variationsmethode

Wir haben gesehen, daß die “Sattelpunktwirkung” eine Funktion des Abstandes D der Potentialtöpfe ist. Die Variation von $\int d^d x V^2$ verschwindet nur, wenn man sie durch eine weitere Nebenbedingung auf einen Unterraum einschränkt, d.h. man gibt den Abstand D vor. Die Nebenbedingung kann man in der Form

$$\int d^d x (V - V_{Sp}(D)) \frac{dV_{Sp}}{dD} = 0 \quad (\text{D.1})$$

wählen; $V - V_{Sp}(D)$ wird also auf den Unterraum orthogonal zum “Gradienten” $\frac{dV_{Sp}}{dD}$ eingeschränkt. Anstelle von (2.9) gilt nun

$$\left(-\Delta + 1 \pm \bar{\omega} - \varphi_1^2 - \varphi_2^2 + \rho_D \frac{dV_{Sp}}{dD} \right) \varphi_{1/2}(\mathbf{x}) = 0, \quad (\text{D.2})$$

mit dem weiteren Lagrangemultiplikator ρ_D . Mit dem Ansatz aus Kap. 2.2 findet man $\rho_D = \rho_D(D) \sim \bar{\omega}^2$ und der Zusatzterm hat keine Auswirkung auf die Resultate des Kapitels, insbesondere nicht auf die Überlappintegrale t und $\int d^d x \varphi_l^2 \varphi_r^2$. Bei der Sattelpunktwirkung $\int d^d x V_{Sp}^2$ gibt es nur eine Korrektur proportional zu $\rho_D^2(D) \sim \bar{\omega}^4$.

D.2 Supersymmetrie

Bei der supersymmetrischen Rechnung erhält man in direkter Verallgemeinerung von [6], (s. Formel (3.5)) für die Wirkung der reellen Felder φ_1, φ_2

$$S[\varphi_1, \varphi_2] = \int d^d x \left\{ (\nabla \varphi_1)^2 + (\nabla \varphi_2)^2 + (1 + \bar{\omega}) \varphi_1^2 + (1 - \bar{\omega}) \varphi_2^2 - \frac{1}{2} (\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2 \right\}. \quad (\text{D.3})$$

Die Variation von (D.3) liefert genau die Sattelpunktgleichungen (2.9),

$$\left(-\Delta + 1 \pm \bar{\omega} - \varphi_1^2 - \varphi_2^2 \right) \varphi_{1/2}(\mathbf{x}) = 0. \quad (\text{D.4})$$

Wie wir bereits wissen, liefert unser Ansatz für $\varphi_{1/2}$ keine exakten Lösungen der Sattelpunktgleichungen, denn für die damit berechnete Wirkung

$$S_{Sp} = \frac{1}{2} \int d^d x (\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2 = \frac{1}{2} \int d^d x V_{Sp}^2 \quad (\text{D.5})$$

(die Herleitung erfolgt wie bei (C.4)) gilt $S = S(D)$, also

$$\left. \frac{dS}{dD} \right|_{Sp} = \int d^d x \left\{ \frac{\delta S}{\delta \varphi_1} \frac{d\varphi_1}{dD} + \frac{\delta S}{\delta \varphi_2} \frac{d\varphi_2}{dD} \right\} \neq 0 \quad (\text{D.6})$$

und die Variation der Wirkung verschwindet höchstens bis auf einen Anteil proportional zu $\frac{d\varphi_{1/2}}{dD}$:

$$\left(-\Delta + 1 \pm \bar{\omega} - \varphi_1^2 - \varphi_2^2 \right) \varphi_{1/2}(\mathbf{x}) = \varepsilon(D) \frac{d\varphi_{1/2}}{dD}(\mathbf{x}). \quad (\text{D.7})$$

Diese Gleichungen besitzen Lösungen $\varphi_{1/2}$ (mit dem Ansatz aus Kap. 2.2) und man findet $\varepsilon(D) \sim \bar{\omega}^2$. Dies ist *nicht* genau derselbe Zusatzterm wie bei (D.2), gibt aber ebenfalls nur eine vernachlässigbare Korrektur $\sim \bar{\omega}^4$ in der Sattelpunktwirkung.

Bei der Berechnung der quadratischen Fluktuationen, die nur in führender Ordnung in $\bar{\omega}$ erfolgt, wird die ‘‘Nahezu-Nullmode’’ $\frac{d\varphi}{dD}$ wie eine Nullmode behandelt. Die anschließende Integration über den Abstand D kann man sich vorstellen wie die Integration längs eines sanft geneigten Talbodens, man spricht auch von der ‘‘Valley-Methode’’ [31], [32].

Literaturverzeichnis

- [1] E. Brézin and G. Parisi, J. Stat. Phys. **19**, 269 (1978)
- [2] E. Brézin and G. Parisi, J. Phys. C **13**, L307 (1980)
- [3] S. John, M. Y. Chou, M. H. Cohen and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B **37**, 6963 (1988)
- [4] S. John, C. Soukoulis, M. H. Cohen and E. N. Economou, Phys. Rev. Lett. **57**, 1777 (1986)
- [5] S. John and M. J. Stephen, J. Phys. C **17**, L559 (1984)
- [6] R. Hayn, W. John, Nucl. Phys. B **348**, 766 (1991)
- [7] A. Houghton, L. Schäfer and F. J. Wegner, Phys. Rev. B **22**, 3598 (1980)
- [8] A. Houghton and L. Schäfer, J. Phys. A **12**, 1309 (1979)
- [9] J. L. Cardy, J. Phys. C **11**, L321 (1978)
- [10] B. I. Halperin, Phys. Rev. **139**, A 104 (1965)
- [11] B. I. Halperin and M. Lax, Phys. Rev. **148**, 722 (1966)
- [12] B. I. Halperin and M. Lax, Phys. Rev. **153**, 802 (1967)
- [13] J. Zittartz and J. S. Langer, Phys. Rev. **148**, 741 (1966)
- [14] D. J. Thouless and M. E. Elzain, J. Phys. C **11**, 3425 (1978)
- [15] I. M. Lifshitz, Adv. Phys. **13**, 483 (1964)
- [16] S. Coleman, *Aspects of symmetry* (Cambridge University Press 1985), Chapter 7: The uses of instantons (1977)

- [17] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul, L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems* (Wiley Interscience 1988)
- [18] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford 1990)
- [19] J. M. Luttinger and R. Tao, *Ann. Phys. (NY)* **145**, 185 (1983)
- [20] J. M. Luttinger and R. Waxler, *Ann. Phys. (NY)* **175**, 319 (1987)
- [21] S. Coleman, V. Glaser, A. Martin, *Comm. Math. Phys.* **58**, 211 (1978)
- [22] N. F. Mott, *Phil. Mag.* **22**, 7 (1970)
- [23] N. F. Mott, E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Clarendon Press, Oxford 1971)
- [24] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, 2nd ed. (Taylor and Francis, London 1990)
- [25] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III, Quantenmechanik* (Akademie-Verlag Berlin 1979)
- [26] J. Langer, *Ann. Phys. (NY)* **41**, 108 (1967)
- [27] P. Van Mieghem, *Band tails in heavily doped semiconductors*, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 755 (1992)
- [28] T. Schäfer, E. V. Shuryak, *Instantons in QCD*, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 323 (1998)
- [29] T. Schäfer, *Phys. Bl.* 55 (1999) Nr. 9, 52
- [30] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, *Disordered Electronic Systems*, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985)
- [31] A. V. Yung, *Nucl. Phys. B* **297**, 47 (1988)
- [32] J. Fuchs, A. Ringwald, *Nucl. Phys. B* **408**, 391 (1993)
- [33] K. B. Efetov, *Adv. Phys.* **32**, 53 (1983), *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge University Press, Cambridge 1997)

- [34] B. Kramer, A. MacKinnon, *Localization: Theory and Experiment*, Rep. Progr. Phys. **56**, 1469 (1993)
- [35] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- [36] D. Thouless, Phys. Rep. **13**, 93 (1974)
- [37] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Lett. **42**, 673 (1979)
- [38] S. V. Kravchenko *et al.* Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994), Phys. Rev. B **51**, 7038 (1995)
- [39] L. I. Deych, A. A. Lisyansky, B. L. Altshuler, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI 53 (1999)

Danksagung

Zunächst danke ich Prof. Peter Wölffe für die interessante Themenstellung, seine fortwährende Unterstützung, und daß er mich meinen Weg gehen ließ.

Prof. Ralph von Baltz danke ich für die Übernahme des Korreferats.

Roland Hayn danke ich für die Gespräche und die vielen E-Mails; Dein anhaltendes Interesse an meiner Arbeit hat mir sehr geholfen.

Allen Mitarbeitern der Institute Theorie der Kondensierten Materie und Theoretische Festkörperphysik ein herzliches Dankeschön für die angenehme Atmosphäre im 10. und 11. Stock des Physikhochhauses; insbesondere Achim Rosch danke ich für viele Anregungen. Gabriel und Dieter, Euch werde ich vermissen.

Herzlichen Dank meinen Freunden, die mich all die Jahre unterstützt haben.

Und nun zu Dir, Katja, seit Anfang des Jahres bist Du der frische Wind in meinem Leben und sollst es auch weiterhin sein, Danke!

Martin Töx
Lindenweg 9
69254 Malsch

Lebenslauf

11. Sept. 1963 geboren in Lörrach/Baden
Familienstand: ledig
- 1969 – 1973 Grundschule
- 1973 – 1982 Gymnasium
- Juni 1982 **Abitur**
19. – 29. Juni 1982 Preisträger bei der 13. Internationalen Schülerolympiade für Physik
- Juli 1982 – Sept. 1983 **Wehrdienst**
- Okt. 1983 – Sept. 1991 **Physikstudium** an der Universität Karlsruhe, gefördert von der Studienstiftung des deutschen Volkes
- Okt. 1985 **Vordiplom** in Physik und Mathematik
- Juli und Aug. 1987 Sommerstudent bei CERN, Genf
- Diplomarbeit** am Institut für Theoretische Physik bei Prof. Hermann Nicolai.
18. Sept. 1991 **Diplom** in Physik
- Nov. 1991 – Juni 2000 **Wiss. Mitarbeiter** am Institut für Theorie der Kondensierten Materie an der Universität Karlsruhe bei Prof. Peter Wölffe
- April 1992 – März 1994 Stipendium der Landesgraduiertenförderung