
Quanteneffekte in nanomechanischen Systemen

Patrick Werner



München 2003

Quanteneffekte in nanomechanischen Systemen

Patrick Werner

Dissertation
an der Fakultät für Physik
der Ludwig–Maximilians–Universität
München

vorgelegt von
Patrick Werner
aus München

München, den 18.12.2003

Erstgutachter: Prof. W. Zwerger

Zweitgutachter: Prof J. von Delft

Tag der mündlichen Prüfung: 25.06.2004

alla mia ragazza

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	vii
Abbildungsverzeichnis	ix
Tabellenverzeichnis	xi
Zusammenfassung	xiii
Einleitung	1
1 Nanomechanische Systeme	5
1.1 Balken-Mechanik	5
1.1.1 Elastizitätstheorie	5
1.1.2 Lagrangefunktion des Balkens mit Kompression	10
1.2 Korrelationsfunktionen der Auslenkung	17
1.2.1 Quantisierung des Feldes	17
1.2.2 Korrelationsfunktionen des Balkens	19
1.3 Diskussion und Vergleich mit Experiment	23
1.3.1 Carbon Nanotubes - kleinste Balken	24
1.3.2 Zahlenwerte	25
1.3.3 Experimentelle Detektion von Auslenkungen	28
1.3.4 Diskussion	31
2 Verstärkung von Fluktuationen durch parametrische Resonanz	33
2.1 Klassischer parametrischer Oszillator	33
2.1.1 Allgemeine Lösung und Stabilität	35
2.1.2 Partikuläre Näherungslösung	40
2.2 Quantenmechanischer parametrischer Oszillator	45
2.2.1 Parametrischer Oszillator ohne Dämpfung	45
2.2.2 Pfadintegraldarstellung der Dichtematrix	47
2.2.3 Berechnung des Evolutionsoperators	50
2.2.4 Korrelationsfunktionen	54
2.2.5 Ergebnisse	59

3	Quanteneffekte nahe der Euler-Instabilität	65
3.1	Nanobalken nahe der Euler-Instabilität	65
3.1.1	Bestimmung des anharmonischen Koeffizienten	66
3.1.2	Hamiltonoperator und kritische Skalen	67
3.2	Anharmonischer Oszillator	69
3.2.1	Mittlere quadratische Auslenkung	71
3.2.2	Anregungsfrequenzen	73
3.3	Makroskopische Quanten-Kohärenz (MQC)	75
3.3.1	Quantenmechanisches Zweizustandssystem	76
3.3.2	Berechnung des Tunnelsplittings Δ	78
3.3.3	Aufhebung der Entartung durch kapazitive Kopplung	82
3.3.4	Einfluss von Dämpfung	83
3.4	Nelsons Quantenmechanik	86
4	Makroskopisches Quantentunneln	91
4.1	Theorie der Quantenzerfallsraten	91
4.2	Anwendung auf SWNTs	99
4.2.1	Quantentunneln bei $T=0$	101
4.2.2	Quantenkorrekturen zur thermischen Zerfallsrate	104
	Resümee	107
A	Korrelationsfunktionen zur parametrischen Resonanz	109
	Literaturverzeichnis	113
	Danksagung	119
	Lebenslauf	121

Abbildungsverzeichnis

1	Makroskopischer Quanteneffekt	3
1.1	Gebogener Balken	7
1.2	Elastische Kurve	9
1.3	Euler-Instabilität	13
1.4	Grundfrequenzen für verschiedene Kompressionen	15
1.5	Moden für verschiedene Kompressionen	16
1.6	Mittlere Auslenkung ohne Kompression	22
1.7	Mittlere Auslenkung mit Kompression	23
1.8	Struktur und molekular-dynamische Simulation einer Nanotubeschicht . . .	24
1.9	Manipulationen von Multi-Wall-Nanotubes	25
1.10	Vibrationen von Multi- und Single-Wall-Nanotubes	26
2.1	Resonanz-Katastrophe	34
2.2	Klassischer parametrischer Oszillator ohne äußeren Antrieb	38
2.3	Klassischer parametrischer Oszillator mit äußerem Antrieb	39
2.4	Parametrische Resonanz versus Squeezing	42
2.5	Stabilitätskriterium für parametrische Lösungen	43
2.6	Wignerfunktion des parametrischen Oszillators	47
2.7	Korrelationsfunktion der Auslenkung σ_{xx}	59
2.8	Quasi-kritisches σ_{xx} für verschiedene Temperaturen und Phasen	60
2.9	Quasi-kritisches σ_{xx} für verschiedene Dämpfungen	61
2.10	Varianzen σ_{pp} und σ_{xp}	62
3.1	Doppelmuldenpotential des anharmonischen Oszillators	70
3.2	Nullpunkts-Fluktuationen in der Nähe der Euler-Instabilität	72
3.3	Fluktuationen für endliche Temperaturen	73
3.4	Anregungsfrequenz nahe der Euler-Instabilität	74
3.5	Anregungsfrequenzen und Wellenfunktionen in symmetriebrochener Phase	75
3.6	“Avoided-level crossing”	77
3.7	Harmonische Näherung im Zweizustandssystem	81
3.8	Messungen von MQC an SQUIDs	86
3.9	Ausgewählte Zufallswege für Markov-Prozess	89
3.10	Fluktuationen mittels Methode des Markov-Prozesses	90

4.1	Zerfallsmechanismen	97
4.2	Korrekturfaktor allgemein	98
4.3	Potential mit Metastabilität	100
4.4	WKB-Tunnelrate	103
4.5	Quantenkorrekturen zu thermischem Entkommen	105
4.6	Quanten-Korrekturfaktor für SWNT	106

Tabellenverzeichnis

1.1	Zahlenwerte für Balken im Vergleich	28
3.1	Parameter-Werte der kritischen Skalen	69
4.1	Koeffizienten für verschiedene Dämpfungen	102
4.2	Parameter-Werte zu Quantentunneln	102
4.3	Umrechnung Verweilzeit-logarithmischer Ausdruck	104
4.4	Parameter-Werte zu thermischem Entkommen	105

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Quanteneffekte in den mechanischen Eigenschaften eines nanomechanischen Balkenresonators untersucht. Dabei werden zunächst Quantenfluktuationen der transversalen Auslenkung des Resonators behandelt. Diese lassen sich durch zwei Verfahren verstärken, dynamisch mittels parametrischer Resonanz, oder statisch durch longitudinale Kompression bis nahe der Euler-Instabilität, bei der sich der Nanobalken klassisch zur Seite biegt. Desweiteren werden die Analogien zu makroskopischer Quantenkohärenz und makroskopischem Quantentunneln in einer quantenmechanischen Beschreibung des Balkens jenseits der Euler-Instabilität diskutiert. Als Modell-Balken wird dabei ein Single-Wall-Carbon-Nanotube von $0.1 \mu\text{m}$ Länge verwendet. Seine ausgezeichneten elastischen Eigenschaften und seine geringe Masse (etwa 20000 C-Atome) machen ihn zum bestmöglichen Kandidat zum Nachweis von makroskopischen Quanteneffekten, und seine thermischen Fluktuationen der mittleren Auslenkung in Balkenmitte sind bereits im Experiment gemessen worden. Das Quantenregime für diese Fluktuationen ist aufgrund der sehr hohen Resonatorfrequenzen im GHz-Bereich ebenfalls experimentell zugänglich; die Quantenfluktuationen selbst sind zwar mit $(0.01 \text{ nm})^2$ sehr klein, aber mit neuesten, extrem sensitiven Sensoren im Prinzip detektierbar. Dynamisch lassen sich die Fluktuationen unter Ausnutzung der parametrischen Resonanz bis auf $\sim (1 \text{ nm})^2$ verstärken, aber nur in einem sich periodisch aufschaukelndem Nichtgleichgewichtsprozess, sodass zu deren Nachweis eine stroboskopische Messmethode verwendet werden muss. Auch durch longitudinale Kompression bis sehr nahe an die Euler-Instabilität, zum Beispiel durch piezoelektrisches Drücken, lassen sich die Quantenfluktuationen verstärken, und zwar bis zu einer neuen, rein quantenmechanisch bestimmten Skala von $\sim 0.1 \text{ nm}$; die parallel dazu reduzierte Frequenzskala ist für typische solche Nanotubes im Bereich von 10 MHz. Jenseits der Euler-Instabilität lässt sich der Balken quantenmechanisch in einer Superposition aus “nach links” und “nach rechts” gebogen beschreiben. Die dann niedrigste Anregungsenergie, die Tunnelfrequenz des entsprechenden Zweizustandensystems, beträgt nur noch einige MHz. Makroskopisches Quantentunneln aus einem durch kapazitive Kopplungen metastabil gemachten Zustand “links” ergibt eine sehr niedrige Übergangstemperatur zum Quantenregime von 0.7 mK, man erhält dennoch eine Quantenkorrektur zum Temperaturverhalten des klassischen Arrhenius-Gesetzes. Insgesamt zeigen die hier vorgestellten Rechnungen, dass durch geeignete Kombination bereits durchgeführter Experimente oder verbesserte Kühlmechanismen Quantenmechanische Effekte, besonders Quantenfluktuationen, in naher Zukunft tatsächlich in makro(nano)skopischen mechanischen Systemen relevant werden können und die “Quantenmechanik” daher wörtlich genommen werden sollte.

Einleitung

Nanomechanische Systeme

Die Nanotechnologie als Modewort der heutigen Wissenschaft nährt die Erwartung, mechanische oder elektromechanische Systeme auf Nanometerskala (NEMS, $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) herzustellen, die als funktionelle Einheiten bestehende Systeme durch weitere Miniaturisierung verbessern, oder aufgrund ihrer Größenordnung mit biologischen Systemen wechselwirken können; eine Vorstellung, welche bisher der Science-Fiction-Literatur (“Die Borg”) [68] vorbehalten war. Wenn auch einige dieser Ziele, wie Nanoroboter, die durch unseren Körper schwirren und Zellen reparieren, gegenwärtig einigermaßen unrealistisch sind, so ist die Nanomechanik doch eines der aktuell auf große Resonanz stoßenden und geförderten Forschungsgebiete nicht nur der Physik [70, 19, 16], sondern auch der Fächer Chemie, Biologie, Medizin und Informationswissenschaft, den potentiellen Nutznießern fortschrittlicher Technik auf diesem Gebiet.

Nanomechanik ist aber nicht einfach die gewöhnliche Mechanik nur auf kleineren Skalen, so gewinnen zum Beispiel Oberflächeneffekte und Materialstruktur an Bedeutung. Obwohl generell auch die Elastizitätstheorie auf sehr kleinen Skalen ihre Gültigkeit verliert, werden wir in dieser Arbeit mit den Carbon-Nanotubes Systeme kennen lernen, die sich noch bis zu Ausmaßen von wenigen Nanometern wie makroskopische elastische Körper verhalten. Der prinzipiell entscheidende Unterschied zwischen Nanomechanik und gewöhnlicher Mechanik ist jedoch, dass Nanosysteme in eine Größenordnung kommen, in der Quanteneffekte eine wichtige Rolle zu spielen beginnen. So ist zum Beispiel die thermische Leitfähigkeit aufgrund von ballistisch propagierenden Phononen quantisiert [76]. In nanomechanischen Systemen kann sich auch der Casimir-Effekt manifestieren [14, 9], das Auftreten einer nichtklassischen anziehenden Kraft zwischen zwei elektrisch neutralen Oberflächen mit sehr geringem Abstand, hervorgerufen durch eine Modifikation des elektromagnetischen Vakuums. Mechanische und elektrische Eigenschaften können kombiniert werden, um etwa Elektronen mit einem “Shuttle” einzeln zu transportieren [22, 77], was aufgrund der Coulomb-Blockade, die in kleinen metallischen Inseln oder Quantendots auftritt, gelingt. Des weiteren mag es möglich sein, aus dem Zusammenspiel von kapazitiven Kräften und Ladungsquantisierung quantisierte Auslenkungen von biegbaren Systemen zu schaffen [72]. Bezüglich möglicher Anwendungen als Nanosensoren sind freitragende Nanobalken interessant [64]. Um genau solche Systeme geht es in dieser Arbeit, um kleinste Resonatoren also, die geeignet sind, Effekte wie Quantisierung von Phononen [69], Erzeugung von Schwin-

gungszuständen nichtklassischer Art [85] oder das quantenmechanische Tunneln aus einem metastabilen Zustand [10] zu untersuchen. Solche Nanoresonatoren werden bereits seit einigen Jahren in Dimensionen von ungefähr $200\text{ nm} \times 200\text{ nm} \times 2000\text{ nm}$ hergestellt; sie können Frequenzen im Radiofrequenz-Bereich $> 100\text{ MHz}$ erreichen, im Bestfall sogar in den Gigahertz-Bereich [44] vordringen, was wichtig ist, damit man mit den im Experiment erreichbaren (tiefen) Temperaturen überhaupt in den Bereich kommen kann, in dem Quanteneffekte nicht von thermischen Effekten überdeckt werden. Unser Hauptaugenmerk, was Modell-Systeme für Nanobalken betrifft, liegt allerdings auf den Carbon-Nanotubes, besonders auf Single-Wall-Nanotubes (SWNTs), die nur aus einer einzigen ‐aufgerollten‐ Graphit-Schicht aus Kohlenstoff-Atomen bestehen [75]. Diese sind aufgrund ihrer elastischen Eigenschaften und vor allem ihrer sehr geringen Masse die besten Kandidaten, um überhaupt Quanteneffekte beobachten zu können, wie in dieser Arbeit gezeigt wird. Glücklicherweise gibt es auch hier große Fortschritte auf experimentellem Gebiet. Während vor einigen Jahren lediglich Nanotubes aus mehreren Schichten (Multi-Wall-Nanotubes, MWNTs) von Längen im μm -Bereich im Experiment verwendet werden konnten und deren thermische Fluktuationen bzw. mittels *ac*- und *dc* Spannungen angeregten Fluktuationen und Verbiegungen gemessen werden konnten [81, 65], ist es kürzlich gelungen, auch SWNTs von nur bis zu 200 nm Länge doppelseitig einzuspannen und deren thermische Fluktuationen zu messen [2].

Aufbau der Arbeit

Im ersten Kapitel wird, ausgehend von den Grund-Gleichungen der Elastizitätstheorie die Lagrangefunktion eines freitragenden Nanobalkens aufgestellt, auf den zusätzlich noch eine longitudinale, kompressive Druck-Kraft ausgeübt werden kann. Nach Quantisierung der Theorie werden die thermischen- und Quantenfluktuationen der transversalen Auslenkung berechnet und deren Nachweismöglichkeit diskutiert. Die Ergebnisse werden für verschiedene Modell-Balken wie Si-Balken, MWNTs und SWNTs verglichen, wobei besonders auf die (SW)NTs als für unsere Zwecke optimalen Kandidaten eingegangen wird.

In Kapitel 2 geht es dann um die prinzipielle Möglichkeit, Fluktuationen mit dynamischen Methoden zu verstärken, die auf der parametrischen Resonanz beruhen. Dazu werden der klassische parametrische Oszillator und darauf aufbauend der quantenmechanische parametrische Oszillator unter Einschluss von Dämpfung behandelt und die Auswirkung der parametrischen Resonanz auf typische SWNTs diskutiert.

Dagegen werden in Kapitel 3 alle dynamischen Antriebe beiseite gelassen; stattdessen wird untersucht, wie sich der Nanobalken verhält, wenn die auf ihn ausgeübte longitudinale Kraft so groß wird, dass er in die Nähe der Euler-Instabilität kommt, dem Bifurkationspunkt, bei dem der Balken sich klassisch zur Seite biegt. Sehr nahe dieser Instabilität werden die neuen relevanten Energie- und Längenskalen berechnet. Jenseits der Euler-Instabilität ergibt sich für die effektive Beschreibung des Balkens ein Doppelmuldenpotential; das motiviert neue physikalische Fragestellungen in Richtung quantenmechanisches Zweizustandssystem und folglich makroskopischer Quanten-Kohärenz (MQC) des Balken-Zustandes. Das Kapitel schließt mit einer Darstellung dieser Problematik mittels ‐Nelsons Quantenmechanik‐,

einem Versuch einer klassischen, statistischen Deutung der Quantenmechanik, die zwar allgemein nicht zutreffend ist, in diesem Fall aber in anschaulicher Weise korrekte Ergebnisse liefert.

Verformt man mittels elektrostatischer Kopplungen das Doppelmuldenpotential stark asymmetrisch, bildet sich ein metastabiler Zustand aus. In diesem Szenario werden im vierten Kapitel Quantentunnelraten und Quantenkorrekturen zur thermischen Tunnelrate aus dem metastabilen Zustand berechnet; damit wird die Möglichkeit zum Nachweis von makroskopischem Quantentunneln (MQT) von SWNTs diskutiert.

Eine Zusammenfassung der Ergebnisse sowie ein Ausblick runden die Arbeit im Resümee ab.



Abbildung 1: Aus [30]. Makroskopischer Quanteneffekt.

Kapitel 1

Nanomechanische Systeme

Ziel dieses Kapitels ist es, die Grund-Gleichungen eines schwingenden Balkens aufzustellen, die für die Berechnung der transversalen Fluktuationen von Nanobalken verwendet werden. Die Ergebnisse für verschiedene Typen von Nanobalken werden verglichen und deren Messbarkeit diskutiert.

1.1 Balken-Mechanik

Werden Balken gebogen, so handelt es sich hierbei mikroskopisch um einen komplizierten Prozess, der auf atomarer Skala die Bindungsenergien beeinflusst. Die Elastizitätstheorie beschreibt die Physik dieser inneren Deformationen und Spannungen auf einer Skala, die groß ist gegen die Reichweite der atomaren Kräfte, und liefert Ausdrücke für Größen wie die freie Energie, die dann nur noch von wenigen Parametern abhängen, welche das elastische Verhalten bestimmen. Nach der Bereitstellung des nötigen Handwerks-Zeug im ersten Abschnitt wird die Lagrangefunktion des Balkens in Abschnitt 1.1.2 aufgestellt.

1.1.1 Elastizitätstheorie

Wie der Name “Elastizitätstheorie” sagt, sollen hier nur Vorgänge beschrieben werden, die keine bleibende Deformation im System hinterlassen; Punkte des Balkens in Ruhe-Lage \mathbf{x} werden zwar verschoben nach \mathbf{x}' , wobei

$$\mathbf{u} = \mathbf{x}' - \mathbf{x} \quad (1.1)$$

den Verschiebungsvektor bezeichnet, sollen aber wieder in ihre Ruhe-Lage zurückkehren, sobald die für die Deformation verantwortlichen Kräfte aufgehoben werden. Über die Änderung des Längen-Elements (es gilt die Einsteinsche Summen-Konvention)

$$dl'^2 = dl^2 + 2u_{ik}dx_id x_k \quad (1.2)$$

ist dann der Verzerrungstensor [49]

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (1.3)$$

definiert. Er ist symmetrisch und punktweise diagonalisierbar. Wird ein Körper aus seiner Gleichgewichtslage deformiert, treten innere Spannungen auf, die der Deformation entgegenwirken. Diese werden durch den Spannungstensor σ_{ik} beschrieben, dessen Ableitungen $\partial\sigma_{ik}/\partial x_k$ die Komponenten der entsprechenden inneren Kräfte ergeben. Der Zusammenhang von Verzerrungs- und Spannungstensor ist durch eine Betrachtung der freien Energie des Körpers gegeben. über die Arbeit, welche von den inneren Kräften geleistet wird, erhält man für das Differential der freien Energie pro Volumen-Einheit [49]

$$df = -sdT + \sigma_{ik}du_{ik} \quad (1.4)$$

mit Entropie pro Volumen s und Temperatur T , was im Fall der hydrostatischen Kompression in das bekannte $d\mathcal{F} = -SdT - pdV$ übergeht. Die Elemente der beiden Tensoren sind also unabhängige Variablen und hängen über

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial f}{\partial u_{ik}} \right)_T \quad (1.5)$$

zusammen. In einem isotropen elastischen Kontinuum gibt es für kleine Deformationen nur zwei unabhängige elastische Konstanten, und die freie Energie lässt sich in einen Scherungs- und einen Dilatationsanteil aufspalten,

$$f = \mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll} \right)^2 - \frac{K}{2}u_{ll}^2 \quad (1.6)$$

mit dem jeweils positiven Torsionsmodul μ und Kompressionsmodul K , bzw. der Kompressibilität $1/K$. Aus diesem Ausdruck kann man schließlich mittels Gl. (1.5) die allgemeine Form des Hookschen Gesetzes erhalten:

$$u_{ik} = \frac{1}{9K}\delta_{ik}\sigma_{ll} + \frac{1}{2\mu} \left(\sigma_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\sigma_{ll} \right). \quad (1.7)$$

Der Verzerrungstensor ist demnach eine lineare Funktion des Spannungstensors, die Deformationen sind also den angreifenden Kräften proportional. Generell ist es üblich, statt K und μ zwei andere unabhängige Parameter zu verwenden, den Elastizitätsmodul oder die Youngsche Zahl E und die Poissonsche Zahl σ . Betrachtet man zum Beispiel homogene Deformationen, für die u_{ik} und damit auch σ_{ik} konstant sind, etwa eine einfache Streckung eines Balkens in x -Richtung, so ist die Längenänderung $\delta L/L$ proportional zur Kraft pro Querschnittsfläche mit Proportionalitätsfaktor $1/E$, in bisheriger Schreibweise

$$u_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{E}. \quad (1.8)$$

Stahl hat beispielsweise einen sehr hohen E-Modul von 10^{11} Pa; hängt man sich also an ein Stahlkabel von 3mm Durchmesser, so wird dieses gerade mal um ein tausendstel seiner Länge gedehnt. Der Elastizitätsmodul hängt über

$$E = \frac{9K\mu}{3(K + \mu)} \quad (1.9)$$

von den alten Modulen ab, die Poissonzahl, welche das Verhältnis der mit einer Längsdehnung einhergehenden Querkontraktion angibt, über

$$\sigma = \frac{3K - 2\mu}{6K + 2\mu}, \quad (1.10)$$

wobei σ üblicherweise positiv ist. Soweit eine für unsere Zwecke ausreichende Zusammenstellung allgemeiner Prinzipien der linearen Elastizitätstheorie. Aus obiger Gl. (1.4) ergibt sich schließlich nach dem Eulerschen Satz für die freie Energie der Ausdruck

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int d^3x \sigma_{ik} u_{ik}, \quad (1.11)$$

der nun für den konkreten Fall eines Nanobalkens bestimmt werden muss.

Anwendung auf Balken

Wir betrachten einen Balken, dessen Länge groß gegenüber seinen Quer-Dimensionen (Breite b , Höhe h oder im Falle eines runden Querschnitts Durchmesser D) sein soll. Die Längsrichtung des Balkens sei in x -Richtung gelegen, und er soll sich in y -Richtung biegen, sodass die xy -Ebene als Biegeebene bezeichnet wird. Durch die Biegung werden einerseits Teile des Balkens komprimiert, auf der anderen Seite Teile des Balkens gedehnt. Dazwischen befindet sich die sogenannte neutrale Fläche, in der keinen inneren Spannungen auftreten, siehe Abb. 1.1. Diese befindet sich für symmetrische Balken in deren Mitte und steht senkrecht auf der Biegeebene. Ihre Schnitt-Linie mit der Biegeebene legt die sogenannte elastische Linie fest, deren Koordinaten aufgrund ihrer Definition durch die Schwerpunkte der Balken-Querschnitte gehen. Das Problem der Bestimmung der Biege-Energie des Balkens

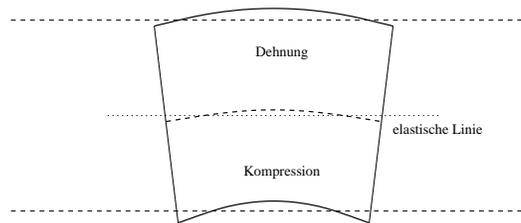


Abbildung 1.1: Balkenbiegung und elastische Linie.

soll nun zunächst so vereinfacht werden, dass nur noch die Kurvenlage seiner elastischen Linie eingeht. Wir betrachten wieder nur homogene Deformationen. Dabei können in erster Näherung die Kräfte, welche auf die Seitenflächen wirken, im Vergleich zu den von σ_{xx} verursachten inneren Kräften vernachlässigt werden, und zusammen mit der Randbedingung $\sigma_{ik} n_k = 0$ (\mathbf{n} ist der äußere Einheitsnormalenvektor auf die Seitenflächen) sind auch alle $\sigma_{i \neq k}$ Null, und nur σ_{xx} ist für die Biegung wichtig. Man könnte nun in nächsthöherer Näherung mittels der Poissonzahl über $u_{\{yy,zz\}} = -\sigma u_{xx}$ berechnen, wie genau sich bei Biegung die Querschnittsfläche z.B. von einem Rechteck zu einem Viereck mit auf zwei Seiten

parabolisch geformten Seitenwänden verzieht. Dies spielt aber für unsere Zwecke keine Rolle; man stellt lediglich fest, dass der gebogene Balken dem Aneinander-Reihen von vielen dieser Querschnitte entspricht, die jeweils um einen infinitesimalen Winkel gegeneinander verdreht sind. Greift man sich nun einen Balkensektor heraus, kann ein (kleines) Längenelement dx in dessen neutraler Fläche immer als Kreisbogen mit Radius R beschrieben werden. Legt man den Ursprung des Koordinatensystems in die neutrale Fläche, so kann ein Längenelement dx' im Abstand y entsprechend als Kreisbogen mit Radius $R + y$ angesehen werden. Es gibt also eine Verzerrung zu $dx' = (R + y)/R \cdot dx$ und damit eine Komponente des Verzerrungstensors

$$u_{xx} = \frac{dx' - dx}{dx} = \frac{y}{R}. \quad (1.12)$$

Aufgrund des Hookschen Gesetzes erhält man daraus den Spannungstensor

$$\sigma_{xx} = \frac{y}{R} \cdot E \quad (1.13)$$

und die freie Energie pro Volumeneinheit

$$f = \frac{1}{2} \sigma_{xx} u_{xx} = \frac{E}{2} \frac{y^2}{R^2}. \quad (1.14)$$

Integriert man diesen Ausdruck über die Querschnittsfläche des Balkens, so erhält man schließlich für die freie Energie pro Längen-Segment

$$\frac{\mathcal{F}}{\Delta l} = \frac{E \cdot I}{2 R^2} \quad (1.15)$$

wobei das Trägheitsmoment der Querschnittsfläche $I = \int y^2 da$ im Falle des rechteckigen, quer zur Höhe gebogenen Balkens durch

$$I = I_z = \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_{-b/2}^{b/2} y^2 dy = \frac{b^3 h}{12} \quad (1.16)$$

und im Falle des Balkens mit kreisförmigen Querschnitt durch

$$I = \int_0^{2\pi} \sin^2(\phi) d\phi \int_0^{D/2} y^2 dy = \frac{\pi D^4}{64} \quad (1.17)$$

gegeben ist. Kennt man also die Krümmung $1/R$ in jedem Punkt der elastischen Linie, so ist mit obiger Gleichung (1.15) die Biege-Energie des Balkens bestimmt.

Parametrisierung der elastischen Linie

Das Koordinatensystem sei so gewählt, dass seine x -Achse mit der elastischen Linie im Kräfte-freien Fall (ohne Biegung) übereinstimmt. Auslenkungen der Linie sind dann in y -Richtung, die elastische Linie wird also durch eine ebene Kurve $y(x)$ beschrieben. Diese

sei an ihrem (linken) Ende bei $x = 0$ fixiert, $y(x = 0) = 0$. Desweiteren gilt auch für die rechte Seite $y = 0$. Man muss nun aber zwischen zwei möglichen Parametrisierungen unterscheiden. Die erste Möglichkeit ist, dass das rechte Ende am raumfesten Punkt $x = L$ fixiert ist. Dann ist die Auslenkung durch eine Funktion $y = \phi(x)$ bestimmt, aber die Länge der Kurve wäre bei einer beliebigen Biegung größer als die tatsächliche Ruhelänge. Da die Auslenkungen klein gegenüber der Länge sein sollen, spielt dies bei Betrachtung der Krümmung, wie man unten sehen wird, in niedrigster Ordnung von ϕ' keine Rolle. Da wir im späteren Verlauf der Arbeit allerdings auch Terme höherer Ordnung mitnehmen werden, verwenden wir als natürliche Parametrisierung die Bogenlänge der Kurve $s \in [0, L]$, die durch das Weg-Element ds mit $ds^2 = dx^2 + dy^2$ beschrieben ist, und schreiben für die Auslenkung $y(s) = \phi(x(s))$. Die physikalische Konsequenz dieser Parametrisierung ist, dass die Länge des Balkens L fest ist, der Balken also als inkompressibel angenommen wird. Dabei bleibt der Balken rechts eingespannt, $y(L) = \phi(x(L)) = 0$, aber die Koordinate $x(L)$ ist nicht mehr raumfest. Der Übergang der Parametrisierung x zur Parametrisierung s ist am besten durch eine Hilfsgröße, den Winkel θ , beschrieben, der über

$$\tan \theta = \frac{d\phi(x)}{dx} = \frac{dy}{dx} \quad (1.18)$$

die Steigung in jedem Punkt der Kurve definiert. Also gilt für das Weg-Element der Kurve

$$ds = \sqrt{1 + \left(\frac{d\phi(x)}{dx}\right)^2} dx = \frac{1}{\cos \theta} dx \quad (1.19)$$

und für die Differentiale $dx/ds = \cos \theta$ und $dy/ds = \sin \theta$. Dies ist schematisch in Abb. 1.2 zu sehen. Aus der Gleichung, welche die feste Länge in beiden Parametrisierungen be-

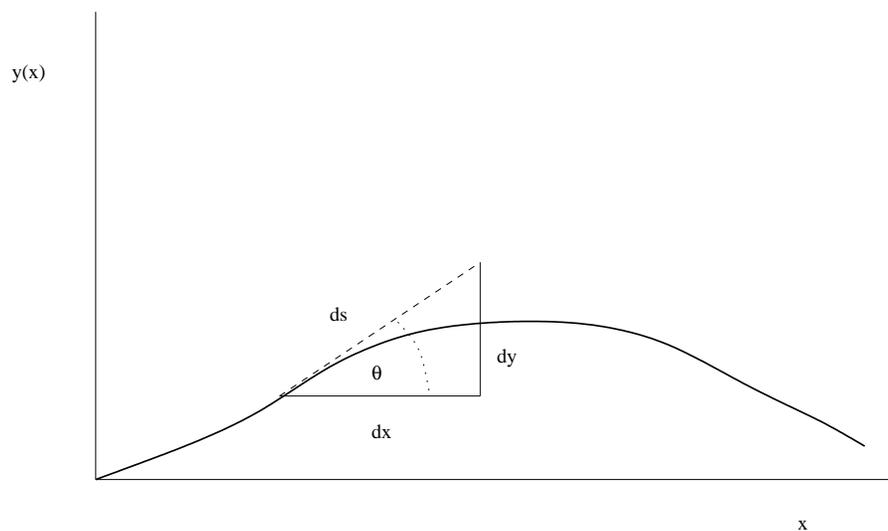


Abbildung 1.2: Parametrisierung der elastischen Kurve durch Bogenlänge s und Krümmung $|d\theta(s)/ds|$.

schreibt

$$L = \int_0^L ds = \int_0^{x(L)} \sqrt{1 + \tan^2 \theta} dx \quad (1.20)$$

erhält man unter Verwendung der trigonometrischen Identität $1 + \tan^2 \theta = (1 - \sin^2 \theta)^{-1}$ die x -Koordinate des Kurvenendes in Abhängigkeit der Kurvenform $\phi(x(s))$ durch Inversion:

$$x(L) = \int_0^{x(L)} dx = \int_0^L \sqrt{1 - \left(\frac{d\phi(s)}{ds}\right)^2} ds, \quad (1.21)$$

wobei $|d\phi(s)/ds| < 1$ immer erfüllt ist. Die Krümmung der Kurve in jedem Punkt ist definiert durch die Änderung des Winkels θ mit der Bogenlänge,

$$\frac{1}{R} = \left| \frac{d\theta(s)}{ds} \right|. \quad (1.22)$$

Für einen Kreis wäre R konstant, für eine allgemeine Kurvenform erhält man je nach Parametrisierung über $d\phi(x)/dx = \tan \theta$ bzw. $d\phi(s)/ds = \sin \theta$ die Krümmungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} &= \left| \frac{d^2\phi}{dx^2} \right| \cdot \left(1 + \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}} && \text{Parametrisierung } x \\ \frac{1}{R} &= \left| \frac{d^2\phi}{ds^2} \right| \cdot \left(1 - \left(\frac{d\phi}{ds} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} && \text{Parametrisierung } s. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Im Grenzfall schwacher Krümmung $d\phi/ds \simeq d\phi/dx \ll 1$ vereinfachen sich diese Ergebnisse zu $|\phi''|$, und wie schon angedeutet spielt die Parametrisierung in führender Ordnung in Entwicklung nach $|\phi'|$ (aber nur dort) keine Rolle.

1.1.2 Lagrangefunktion des Balkens mit Kompression

Zur Aufstellung der Lagrangefunktion $L = T - U$ des Balkens nehmen wir an, dass in der potentiellen Energie zusätzlich zur Biege-Energie des Balkens, E_B , noch eine äußere Kraft F in longitudinaler Richtung auf den Balken wirkt und dabei eine äußere Arbeit $W_A = F \cdot \Delta x$ am Balken verrichtet, wobei die Vorzeichen-Konvention hier so gewählt ist, dass $F > 0$ und $\Delta x < 0$ im Fall von Kompression gelten soll. Ist man nur am freien Balken interessiert, kann F in den folgenden Ausdrücken gleich Null gesetzt werden. Wir schreiben also $U = E_B + W_A$ und betrachten die Terme im Einzelnen. Alle Energien sind Funktionale der Kurvenform $\phi(s)$ der elastischen Linie des Balkens. Für die Biege-Energie muss nur noch der Ausdruck auf der rechten Seite von Gl. (1.15) über die Balkenlänge integriert

werden. Mit Gl. (1.23) gilt dann

$$\begin{aligned} E_B &\equiv \frac{\mu}{2} \int_0^L \frac{ds}{R^2} = \frac{\mu}{2} \int_0^L \frac{\left(\frac{d^2\phi}{ds^2}\right)^2}{\left(1 - \left(\frac{d\phi}{ds}\right)^2\right)} ds \\ &\simeq \frac{\mu}{2} \int_0^L \phi''^2(s) [1 + \phi'^2(s) + \mathcal{O}(\phi'^4(s))] ds, \end{aligned} \quad (1.24)$$

wobei mit $\mu = E \cdot I$ noch der Biegesteifigkeit des Balkens als Produkt aus Elastizitätsmodul und Querschnitts-Trägheitsmoment eingeführt ist (nicht zu verwechseln mit dem Torsionsmodul aus vorherigem Abschnitt). In dem Ausdruck für die äußere Arbeit ist der Wegunterschied Δx durch die Differenz der x -Koordinate des Balkenendes $x(L)$ im gebogenen und freien Fall (mit $x(L) = L$, also der tatsächlichen Balkenlänge) gegeben. Mit Gl. (1.21) ergibt sich also

$$\begin{aligned} W_A &= F \int_0^L \left(\sqrt{1 - \left(\frac{d\phi}{ds}\right)^2} - 1 \right) ds \\ &\simeq -\frac{F}{2} \int_0^L \left[\phi'^2(s) + \frac{1}{4} \phi'^4(s) + \mathcal{O}(\phi'^6) \right] ds. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Für die Berechnung der kinetischen Energie T des Balkens kann man bei angenommener homogener Massendichte $\sigma = m/L$ (nicht zu verwechseln mit der Poissonzahl aus dem vorherigen Abschnitt) die kinetische Energie der elastischen Linie verwenden, da diese ja über die Schwerpunkte der Balken-Querschnitte definiert war. Es ergibt sich damit

$$T = \frac{\sigma}{2} \int_0^L \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 ds. \quad (1.26)$$

Damit lautet die klassische Lagrange-Funktion: $L[\phi] = \int_0^L ds \mathcal{L}(\phi(s), \dot{\phi}(s))$ mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}(\phi(s), \dot{\phi}(s)) = \frac{\sigma}{2} \dot{\phi}^2 - \frac{\mu}{2} \frac{\phi''^2(s)}{1 - \phi'^2(s)} - F \left(\sqrt{1 - \phi'^2} - 1 \right). \quad (1.27)$$

Im Falle kleiner Auslenkungen des Balkens gilt auch $|\phi'(s)| \ll 1$ so dass man in führender Ordnung, der quadratischen Näherung, eine Lagrange-Funktion

$$L_{\text{lin}} = \frac{\sigma}{2} \int_0^L \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 ds - \frac{\mu}{2} \int_0^L \left(\frac{d^2\phi}{ds^2} \right)^2 ds + \frac{F}{2} \int_0^L \left(\frac{d\phi}{ds} \right)^2 ds \quad (1.28)$$

erhält, die sofort auf lineare Bewegungsgleichungen führt.

Stationäre Lösungen und Euler-Instabilität

Die statische Form der Balken-Auslenkung $\phi(s, t) = \phi(s)$ in der quadratischen Näherung Gl. (1.28) ergeben sich als Lösungen der zugehörigen Euler-Lagrange Gleichung

$$\frac{\delta L[\phi]}{\delta \phi} = 0. \quad (1.29)$$

Unter Verwendung von $\delta (\phi^{(n)})^2 / \delta \phi = 2\phi^{(n)} \cdot \delta (\phi^{(n)}) / \delta \phi$ sowie n -facher partieller Integration ergibt sich

$$\mu \frac{d^4 \phi}{ds^4} + F \frac{d^2 \phi}{ds^2} = 0. \quad (1.30)$$

Die allgemeine Lösung davon lässt sich sofort angeben

$$\phi(s) = As + B + C \cos(ks) + D \sin(ks) \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{F}{\mu} \quad (1.31)$$

wobei die Konstanten A, B, C, D durch die Randbedingungen über vier Bestimmungsgleichungen festgelegt sind. Wir wollen dabei nicht auf komplexe molekulare Bindungseigenschaften zwischen den Rändern des freitragenden Balkens und dem Trägermaterial eingehen, sondern nehmen Gültigkeit der Elastizitätstheorie auch für die Randbedingungen an und unterscheiden zwei Typen von Randbedingungen [49]:

- i) Der Balken sei an seinen Enden fest eingespannt, sodass

$$\phi(0) = \phi(L) = 0 \quad \text{und} \quad \phi'(0) = \phi'(L) = 0 \quad (1.32)$$

gilt.

- ii) Der Balken sei bei $s = 0, L$ derart eingespannt, dass dort keine Biegemomente auftreten, die Enden also beweglich gelagert sind:

$$\phi(0) = \phi(L) = 0 \quad \text{und} \quad \phi''(0) = \phi''(L) = 0. \quad (1.33)$$

Beide Randbedingungen führen auf die gleiche Physik, wenn auch mit anderen quantitativen Ergebnissen. Die physikalisch korrekte Randbedingung hängt von der konkreten Realisierung ab. Im Hinblick auf aktuelle Experimente [2] werden wir die Randbedingung i) verwenden und im folgenden knapp als "feste RB" bezeichnen. Da sich andererseits mit der Randbedingung ii) manche Größen explizit analytisch ausdrücken lassen, werden wir sie zu diesem Zweck benutzen, und bezeichnen sie abkürzend mit "freie RB".

Zunächst gilt für beide Randbedingungen, dass für keine Kraft oder sehr kleine Kraft F nur die triviale Lösung $\phi = 0$ gilt: Entsprechend der Erwartung bleibt der Balken in seiner Gleichgewichtslage (anders als in der dynamischen Beschreibung später, wo schon die kleinste Kraft Auswirkungen auf das Frequenzspektrum hat). Desweiteren erwartet man, dass der Balken sich ab einer bestimmten Kompressionskraft spontan nach irgendeiner

Seite biegen wird. Dies wird klar, betrachtet man die Lösungen Gl. (1.31) für freie RB die durch

$$\phi_n(s) = \mathcal{A}_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}s\right) \quad \text{freie RB} \quad (1.34)$$

gegeben sind. Die Sinus-artige Auslenkung ϕ_1 ist aber erst dann eine mögliche nicht-triviale Lösung von Gl. (1.30), wenn $\pi^2/L^2 = k^2 = F/\mu$ gilt, das heißt, sobald die Kraft von unten die kritische Kraft

$$F_c \equiv \mu \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \quad \text{freie RB} \quad (1.35)$$

erreicht. Der Bifurkationspunkt, an dem neben $\phi = 0$ noch $\phi = \phi_1$ die Balken-Gleichung erfüllt, ist die Euler-Instabilität [66]. Sobald man die kompressive Kraft über die kritische

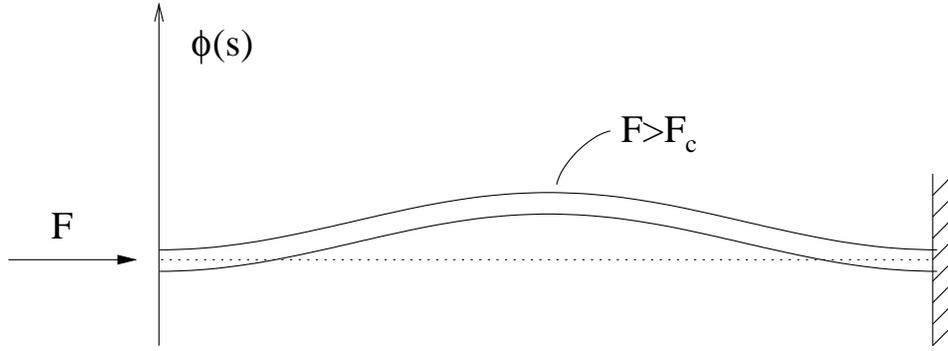


Abbildung 1.3: Euler-Instabilität bei Erreichen der kritischen Kraft, Situation für feste RB.

Kraft hinaus erhöht, wird $\phi = 0$ instabil und ϕ_1 die stabile Lösung. Die Amplitude \mathcal{A}_1 ist erst durch Mitnahme von quartischen Termen in der Lagrangefunktion bestimmt, wie in Kapitel 3 zu sehen sein wird. Erhöht man die Kraft noch weiter, $F \gg F_c$, so wird man irgendwann den Gültigkeitsbereich der Elastizitätstheorie verlassen und der Balken wird je nach Material brechen oder sich inelastisch verbiegen. Für unsere festen Randbedingungen gilt das gleiche Szenario, allerdings lauten die Lösungen

$$\phi_n(s) = \mathcal{A}_n \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}s\right) \right) = \mathcal{A}_n \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}s\right) \quad \text{feste RB}, \quad (1.36)$$

und die entsprechende kritische Kraft ist 4 mal so groß wie die für freie RB,

$$F_c \equiv \mu \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \quad \text{feste RB}. \quad (1.37)$$

Dynamik und Schwingungslösungen

Aus der zeitabhängigen Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L[\phi]}{\delta \dot{\phi}} - \frac{\delta L[\phi]}{\delta \phi} = 0 \quad (1.38)$$

ergibt sich wiederum in quadratischer Näherung Gl. (1.28) die Bewegungsgleichung

$$\sigma \frac{d^2\phi}{dt^2} + \mu \frac{d^4\phi}{ds^4} + F \frac{d^2\phi}{ds^2} = 0. \quad (1.39)$$

Wir sind an Schwingungslösungen interessiert und separieren die Variablen $\phi(s, t) = \mathcal{A}(t)g(s)$. Dann ergibt sich

$$\sigma \frac{d^2\mathcal{A}}{dt^2} \frac{1}{\mathcal{A}} = -\mu \frac{d^4g}{ds^4} \frac{1}{g} - F \frac{d^2g}{ds^2} \frac{1}{g} = \text{const} \equiv -\sigma\omega^2, \quad (1.40)$$

und man erhält mit der Definition der Konstanten die gewünschte Differentialgleichung der harmonischen Schwingung

$$\frac{d^2}{dt^2}\mathcal{A} + \omega^2\mathcal{A} = 0. \quad (1.41)$$

Um die Modenform zu bestimmen, wählt man in der Differentialgleichung für $g(s)$

$$-\sigma\omega^2 g + \mu \frac{d^4g}{ds^4} + F \frac{d^2g}{ds^2} = 0 \quad (1.42)$$

den Ansatz $g(s) = \exp(\lambda s)$, und erhält eine charakteristische Gleichung

$$-\sigma\omega^2 + \mu\lambda^4 + F\lambda^2 = 0. \quad (1.43)$$

$g(s)$ besteht demnach im allgemeinen aus einer Überlagerung von trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen. Die vier Randbedingungen gelten natürlich zu allen Zeiten und legen, da $g(s)$ nur bis auf einen Amplituden-Faktor festgelegt ist, die Dispersionsrelation und damit die Eigenfrequenzen des Balkens fest. Im Falle der freien RB ergeben sich für die Modenfunktion mit $g_n(s) = \sin(n\pi s/L)$ genau die Lösungen der statischen Situation und man erhält insgesamt

$$\phi(s) = \sum_n \phi_n(s) = \sum_n \mathcal{A}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{L}s\right) \quad \text{freie RB} \quad (1.44)$$

mit der Frequenz der n -ten Mode

$$\omega_n = \left(\frac{\mu(n\pi/L)^2 - F}{\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{n\pi}{L} \quad \text{freie RB} \quad (1.45)$$

Man erkennt, dass sich die Frequenzen ohne Kompression ($F = 0$) wie $\omega_k \sim k^2$ verhalten mit $k \equiv n\pi/L$; das ist die typische Dispersionsrelation eines Balkens, im Gegensatz zur Dispersion $\omega_k \sim k$ einer gespannte Saite mit Zugspannung $F < 0$, $|F| \gg \mu k^2$. Desweiteren wird klar, dass die Grundfrequenz ω_1 beim Erreichen der Euler Instabilität ($F \rightarrow F_c$) verschwindet, und zwar wie $\omega_1 \sim \sqrt{F_c - F}$. Die Tatsache, dass ω_1 für $F > F_c$ nicht mehr definiert ist, spiegelt die Situation einer Schwingung um eine inzwischen instabil gewordene

Ruhe-Lage wieder. Definiert man sich einen dimensionslosen Parameter, der den Abstand von der kritischen Kraft angibt

$$\varepsilon = \frac{F_c - F}{F_c} \quad (1.46)$$

so kann man noch über

$$\omega_1(F \rightarrow F_c) = \sqrt{\varepsilon} \frac{\mu}{\sigma} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \equiv \sqrt{\varepsilon} \cdot \omega_0 \quad (1.47)$$

eine Frequenzskala ω_0 festlegen. In diesem Fall der freien RB gilt natürlich $\omega_0 = \omega_1(F = 0)$ und ω_0 ist die charakteristische Frequenz des Balkens ohne Kompression.

Betrachten wir nun den Fall der festen RB. Hier können nicht einfach die statischen Lösungen verwendet werden. Stattdessen erhält man für die Wurzeln der charakteristischen Gleichung (1.43) $\lambda = \pm\lambda_-, \pm i\lambda_+$ mit

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2\mu} \left(\sqrt{F^2 + 4\omega^2\sigma\mu} \pm F \right)}. \quad (1.48)$$

Die Randbedingungen ergeben eine transzendente Gleichung

$$b(\lambda_{\pm}) \equiv (\lambda_+^2 - \lambda_-^2) \sinh(\lambda_- L) \sin(\lambda_+ L) + 2\lambda_+\lambda_- (\cosh(\lambda_- L) \cos(\lambda_+ L) - 1) = 0, \quad (1.49)$$

der die in λ_{\pm} enthaltenen Eigenfrequenzen ω_n genügen müssen. In Abb. 1.4 erkennt man die kleiner werdende Grundfrequenz bei steigender Kompression als numerische Lösung von Gl. (1.49). Setzt man diese ω_n in Gl. (1.49) ein, ergeben sich die zugehörigen $\lambda_{\pm,n}$. Wir

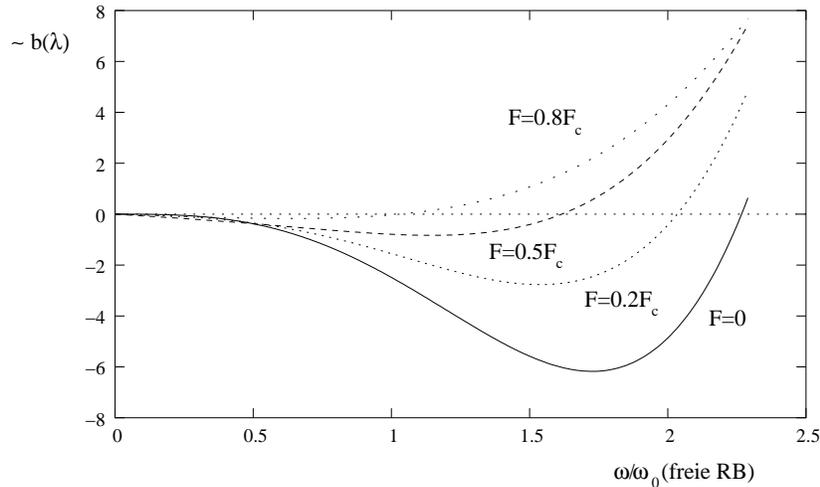


Abbildung 1.4: Numerische Bestimmung der fundamentalen Frequenzen $\omega_1(F)$ aus Gl. (1.49) für verschiedene Kompressionen $F = 0, 0.2F_c, 0.5F_c, 0.8F_c$.

wählen die Modenfunktionen so, dass $g(L/2) = 1$ gilt und damit die Auslenkung der n -ten Mode in der Mitte des Balkens durch \mathcal{A}_n gegeben ist. Damit gilt

$$g_n(s) = \frac{G(\lambda_{\pm,n}; s)}{G(\lambda_{\pm,n}; L/2)} \quad (1.50)$$

mit der Modenform

$$G(\lambda_{\pm,n}; s) = (\cos(\lambda_+ L) - \cosh(\lambda_- L)) \left[\sinh(\lambda_- s) - \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \sin(\lambda_+ s) \right] + \left(\sinh(\lambda_- L) - \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \sin(\lambda_+ L) \right) [\cosh(\lambda_- s) - \cos(\lambda_+ s)]. \quad (1.51)$$

Wir betrachten diese Ergebnisse für zwei Fälle, den Fall ohne Kompression ($F = 0$)

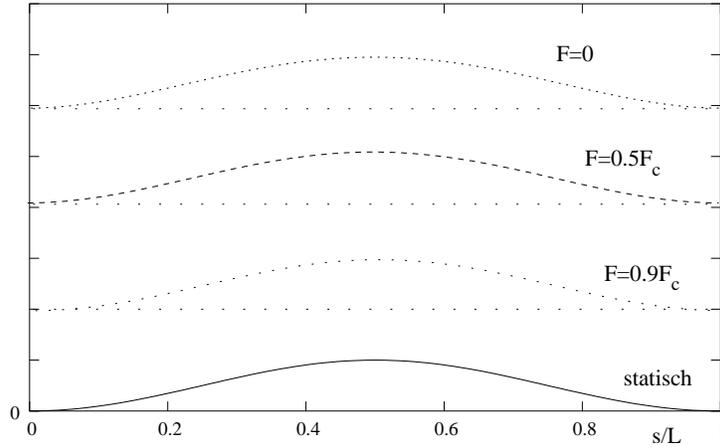


Abbildung 1.5: Form der fundamentalen Mode für verschiedene Kompressionen $F = 0, 0.5F_c, 0.9F_c$ im Vergleich zur statischen Lösung. Die Unterschiede sind vernachlässigbar.

und den der fast kritischen Fall $F \rightarrow F_c$, genauer. Im Kräfte-freien Fall wird $\lambda_{\pm} = \lambda = (\sigma/\mu)^{1/4} \sqrt{\omega}$, und die Bedingung Gl. (1.49) vereinfacht sich auf

$$\cosh(\lambda L) \cos(\lambda L) - 1 = 0. \quad (1.52)$$

Die erste Eigenfrequenz $\omega_1(F = 0)$ ist dann durch die erste nicht-triviale Nullstelle von Gl. (1.52) bestimmt, für die man numerisch $\lambda L = 4.73$ erhält. Daraus ergibt sich

$$\omega_1(F = 0) = 2.27 \cdot \sqrt{\frac{\mu}{\sigma}} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \quad \text{feste RB.} \quad (1.53)$$

Die Grundfrequenz ist also um einen Faktor 2.27 höher als im Fall der freien RB. Für höhere Moden gilt approximativ $\lambda L \simeq (2n + 1) \cdot \pi/2$ und damit

$$\omega_n(F = 0) \simeq \left(\frac{2n + 1}{2} \right)^2 \sqrt{\frac{\mu}{\sigma}} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2. \quad (1.54)$$

Befindet man sich dagegen in der Nähe der Euler-Instabilität, wird ω_1 wieder wie $\sqrt{\varepsilon}$ verschwinden. Tatsächlich findet man

$$\omega_1 \sim \frac{4}{\sqrt{3}} \left(\frac{F_c - F}{\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (1.55)$$

sowie die Beziehungen

$$\begin{aligned}\omega_1(F \rightarrow F_c) &\equiv \sqrt{\varepsilon} \cdot \omega_0 \\ \omega_0 &= \frac{4}{2.27 \cdot \sqrt{3}} \omega_1(F=0) \simeq 1.02 \cdot \omega_1(F=0).\end{aligned}\quad (1.56)$$

Für die Modenfunktion g_1 selbst erwartet man aufgrund der festen Randbedingungen eine Auslenkungsform von näherungsweise der statischen Lösung $\sin^2(\pi s/L)$. Nahe der Instabilität erhält man mit Gl. (1.55) und Gl. (1.48) $\lambda_+ L \simeq 2\pi - 2\pi/3 \cdot \varepsilon$ und $\lambda_- L \simeq \sqrt{12}\pi \cdot \sqrt{\varepsilon}$ und kann die Modenform nach kleinen ε entwickeln zu

$$g_1(s) \sim \sin^2\left(\frac{\pi s}{L}\right) + \varepsilon \cdot \left[\frac{\pi^2}{3} \left(\frac{s^2}{L^2} - \frac{s}{L} \right) + \sin^2\left(\frac{\pi s}{L}\right) \left(\frac{3 + 2\pi^2}{9} + \left(\frac{1}{3} - \frac{2s}{3L} \right) \cot\left(\frac{\pi s}{L}\right) \right) \right], \quad (1.57)$$

und es ergibt sich das erwartete Ergebnis. Auch im Kräfte-freien Fall unterscheidet sich die Auslenkungsform nur unwesentlich von $\sin^2(\pi s/L)$, wie in Abb. 1.5 zu sehen. Für die weitere Betrachtungen in Kapitel 3 werden wir also die vereinfachte Modenform

$$g_1(s) \simeq \sin^2\left(\frac{\pi s}{L}\right) \quad \text{feste RB} \quad (1.58)$$

verwenden. Die Lösung für das Feld in Moden-Zerlegung lautet also insgesamt

$$\phi(s, t) = \sum_n \mathcal{A}_n(t) g_n(s) \quad (1.59)$$

mit den in den Gln. (1.50, 1.51) definierten Moden.

1.2 Korrelationsfunktionen der Auslenkung

Die eben hergeleitete Theorie des Balkens unter Kompression wird nun quantisiert. Im zweiten Abschnitt werden dann die klassischen und quantenmechanischen Korrelationen der Auslenkung berechnet.

1.2.1 Quantisierung des Feldes

Die Auslenkung $\phi(s, t)$ stellt ein eindimensionales klassisches Feld dar und lässt sich demnach kanonisch quantisieren. Dabei wird zunächst zu der vollen Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{\sigma}{2} \dot{\phi}^2 - \frac{\mu}{2} \frac{\phi'^2}{(1 - \phi'^2)} - F \left[\sqrt{(1 - \phi'^2)} - 1 \right] \quad (1.60)$$

das entsprechend zu ϕ konjugierte Feld

$$\pi(s, t) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \sigma \dot{\phi} \quad (1.61)$$

definiert. Damit lautet die Hamiltonsche Dichte $\mathcal{H} = \pi\dot{\phi} - \mathcal{L}$

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) = \frac{\pi^2}{2\sigma} + \frac{\mu}{2} \frac{\phi'^2}{(1 - \phi'^2)} + F \left[\sqrt{(1 - \phi'^2)} - 1 \right]. \quad (1.62)$$

In der kanonischen Quantisierung werden nun die Felder ϕ, π zu Operatoren $\hat{\phi}, \hat{\pi}$, die zu gleichen Zeiten die Vertauschungsrelation

$$[\hat{\phi}(s, t), \hat{\pi}(s', t)] = i\hbar\delta(s - s') \quad (1.63)$$

erfüllen. Wir betrachten wir zunächst (in Kapitel 1) nur die wechselwirkungsfreie Theorie, also Gl. (1.62) in quadratischer Näherung

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) \simeq \frac{\pi^2}{2\sigma} + \frac{\mu}{2} (\phi'')^2 - \frac{F}{2} (\phi')^2. \quad (1.64)$$

Da man in diesem Fall die Eigenmoden des klassischen Problems schon kennt, ist es günstig, das quantisierte Feld durch die quantisierten Moden $\hat{A}_n g_n(s)$ auszudrücken. Führt man für jede Mode, nun passenderweise mit k statt n durchnummeriert, Erzeuger \hat{a}_k^\dagger und Vernichter \hat{a}_k ein, die der Vertauschungsrelation

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k, k'} \quad (1.65)$$

genügen, so sind die Amplituden der Moden über

$$\hat{A}_k = \frac{1}{\sqrt{2}} l_k \left(\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k \right) \quad (1.66)$$

gegeben, wobei mit $l_k^2 = \hbar/m_k\omega_k$ die k -te Oszillatorlänge eingeführt wird. Damit lautet die Moden-Zerlegung des Feldes

$$\hat{\phi}(s) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2m_k\omega_k}} g_k(s) \left(\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k \right), \quad (1.67)$$

und das System Balken ist in der quadratischen Näherung wie erwartet durch eine Summe von harmonischen Oszillatoren beschrieben:

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right). \quad (1.68)$$

Diese Moden-Zerlegung eines kontinuierlichen Systems findet sich in [3] für den analogen Fall eines elastischen Fadens unter Zugspannung.

Die Frequenzen ω_k waren im Fall der freien RB explizit gegeben, mit $k = n\pi/L$ ist

$$\omega_k = \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \sqrt{\mu k^2 - F} \cdot k \quad \text{freie RB}, \quad (1.69)$$

im Fall der für uns relevanten festen RB folgen die Frequenzen aus den Gln. (1.49, 1.48).

Modenmassen und effektive Masse

In der formalen Beschreibung des Systems nach (1.68) ist nicht mehr erkennbar, dass das Ursprungssystem ein elastischer Balken war. Stattdessen handelt es sich um ein System harmonischer Oszillatoren mit Massen m_k und Frequenzen ω_k . Die Massen erhält man, indem man die Koeffizienten der quadratischen Ausdrücke der Hamiltonfunktion $H = \int_0^L \mathcal{H} ds$ berechnet. Sie unterscheiden sich von der tatsächlichen Balkenmasse $m = \sigma L$ durch einen Faktor der auftretenden Modenintegrale

$$m_k = \sigma \cdot \int_0^L g_k^2(s) ds. \quad (1.70)$$

Im Fall der freien RB ergibt sich sofort $m_k = \sigma L/2$ für alle Moden k . Im Fall der festen RB sind die m_k schwach modenabhängig, aber für die wichtige fundamentale Mode können wir, wie oben gesehen, $g_{k=1}(s) \simeq \sin^2(\pi s/L)$ gut approximieren und erhalten $m_1 = 3\sigma L/8$. Da im Folgenden eigentlich nur die fundamentale Mode eine wichtige Rolle spielen wird, zeichnen wir deren Masse durch die Definition der in unserer Beschreibung effektiven Masse des Balkens aus:

$$m_{\text{eff}} = m_{k=1} = \begin{cases} 1/2 \sigma L & \text{freie RB} \\ 3/8 \sigma L & \text{feste RB.} \end{cases} \quad (1.71)$$

1.2.2 Korrelationsfunktionen des Balkens

Nun geht es um die Berechnung von Korrelationsfunktionen der Balken-Auslenkung der allgemeinen Form

$$\mathcal{C}_+(s, s', t - t') = \langle \phi(s, t) \phi(s', t') \rangle. \quad (1.72)$$

Daraus lassen sich Größen wie die mittlere quadratische Auslenkung in der Balkenmitte oder das Powerspektrum berechnen, welche experimentell zugänglich sind. Aufgrund der Linearität der Entwicklung (1.67) gilt

$$\mathcal{C}_+(s, s', t - t') = \sum_{k, k'} g_k(s) g_{k'}(s') \langle \mathcal{A}_k(t) \mathcal{A}_{k'}(t') \rangle. \quad (1.73)$$

Zu gleichen Zeiten $t = t' = 0$ reduziert sich das Problem auf die Bestimmung von

$$\langle \mathcal{A}_k \mathcal{A}_{k'} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} (\mathcal{A}_k \mathcal{A}_{k'} e^{-\beta H}) \quad (1.74)$$

mit $Z = \text{Sp} (e^{-\beta H})$ und H aus Gl. (1.68). Die Zustandssumme faktorisiert, $Z = \prod_k Z_k$, und da die Spursumationen geeigneterweise in der Energieeigenbasis $\{|n_k\rangle\}$ ausgeführt werden, hat man

$$Z_k = e^{-\beta \hbar \omega_k / 2} \sum_{n_k} e^{-\beta \hbar \omega_k n_k} = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega_k / 2)} \quad (1.75)$$

und erhält aufgrund der Vertauschungsrelation Gl. (1.65) sofort $\langle \mathcal{A}_k \mathcal{A}_{k'} \rangle = \langle \mathcal{A}_k^2 \rangle \delta_{k,k'}$. Mit $\mathcal{A}_k = l_k(a_k + a_k^\dagger)/\sqrt{2}$ ist schließlich

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_k^2 \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp} (\mathcal{A}_k^2 e^{-\beta H}) \\ &= \frac{1}{Z_k} \frac{l_k^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega_k / 2} \sum_n (2n_k + 1) e^{-\beta \hbar \omega_k n_k} \\ &= \frac{1}{Z_k} \frac{l_k^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega_k / 2} \left(-2 \frac{\partial}{\partial (\beta \hbar \omega_k)} + 1 \right) \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}} \\ &= \frac{l_k^2}{2} \coth (\beta \hbar \omega_k / 2). \end{aligned} \quad (1.76)$$

Im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ lässt sich der \coth entwickeln,

$$\langle \mathcal{A}_k^2 \rangle = \frac{l_k^2}{2} \coth (\beta \hbar \omega_k / 2) \rightarrow \frac{l_k^2}{2} \frac{2}{\beta \hbar \omega_k} = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} = \langle \mathcal{A}_k^2 \rangle_{\text{cl}}. \quad (1.77)$$

und man erhält das klassische Gleichverteilungsergebnis von $\frac{1}{2} k_B T$ pro quadratischen Freiheitsgrad. Im Quanten-Limes $T = 0$ wird $\coth (\beta \hbar \omega_k / 2) = 1$ und man erhält die Nullpunktsfluktuationen

$$\langle \mathcal{A}_k^2 \rangle_{T=0} = \frac{l_k^2}{2}. \quad (1.78)$$

Balken ohne Kompressionskraft

Wirkt auf den Balken keine kompressive Kraft ($F = 0$), so lässt sich der Ausdruck für die Fluktuationen

$$\mathcal{C}_+(s, s') = \frac{\hbar}{\sigma L} \sum_k \frac{1}{\omega_k} g_k(s) g_k(s') \coth \left(\frac{\beta \hbar \omega_k}{2} \right) \quad (1.79)$$

speziell für den Fall der freien RB dank der einfachen Modenform $g_k(s) = \sin(ks)$ weiter analytisch vereinfachen. Dies dient in erster Linie der Frage, welchen Anteil die höheren Moden zu den Fluktuationen beitragen. Mit $\omega_k = \sqrt{\mu/\sigma} k^2$ führt Gl. (1.79) im klassischen Limes auf eine Summe

$$\mathcal{C}_+(s, s')_{\text{cl}} \sim \sum_n \frac{1}{n^4} \sin \left(\frac{n\pi s}{L} \right) \sin \left(\frac{n\pi s'}{L} \right), \quad (1.80)$$

die analytisch bekannt ist [34], und es ergibt sich ein Ergebnis an der gleichen Stelle $s' = s$ von

$$\mathcal{C}_+(s, s) = \frac{L^3}{3\beta\mu} \left(\frac{s}{L} \right)^2 \left(1 - \frac{s}{L} \right)^2. \quad (1.81)$$

Wie erwartet ist das mittlere Auslenkungsquadrat in Balkenmitte am größten,

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle_{\text{cl}} = \frac{k_B T}{48\mu} L^3 = \frac{\pi^4}{96} \frac{k_B T}{m_{\text{eff}} \omega_0^2}, \quad (1.82)$$

und man erhält einen Beitrag der höheren Moden, der die totale mittlere quadratische Auslenkung nur um einen Faktor von $\frac{\pi^4}{96} \simeq 1.015$ größer macht als die mittlere quadratische Auslenkung der ersten Mode allein. Analog erhält man im Quanten-Limes eine Reihe

$$\mathcal{C}_+(s, s')_{\text{qm}} \sim \sum_n \frac{1}{n^2} \sin\left(\frac{n\pi s}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi s'}{L}\right) \quad (1.83)$$

welche ebenfalls analytisch bekannt ist und für $s' = s$

$$\mathcal{C}_+(s, s) = \frac{\hbar L}{2\sqrt{\sigma\mu}} \left(\frac{s}{L}\right)^2 \left(1 - \frac{s}{L}\right)^2. \quad (1.84)$$

ergibt. Die größten Nullpunkts-Fluktuationen sind in Balkenmitte,

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle_{\text{qm}} = \frac{\hbar}{8\sqrt{\sigma\mu}} L = \frac{\pi^2 l_0^2}{8}, \quad (1.85)$$

sie sind also um einen Faktor $\frac{\pi^2}{8} \simeq 1.23$ größer als die der ersten Mode allein; dabei wird die Oszillatorlänge l_0 der fundamentalen Mode durch

$$l_0^2 = \frac{\hbar}{m_{\text{eff}}\omega_0} \quad (1.86)$$

als relevante quantenmechanische Längenskala des Problems ohne Kompression eingeführt. Die entsprechende Temperatur-Skala, auf der der Übergang vom klassischen zum Quanten-Regime erfolgt, ist dann durch

$$T_0 = \frac{\hbar\omega_0}{k_B} \quad (1.87)$$

definiert. Das Ergebnis für die Fluktuationen in Balkenmitte ist in Abb. 1.6 wiedergegeben. Der Unterschied des Beitrages von allen Moden zu dem der fundamentalen Mode allein ist im abgebildeten Temperaturbereich von $[0, 3T_0]$ quasi konstant, d.h. die höheren Moden verhalten sich bereits quantenmechanisch.

Balken mit kompressiver Kraft

Jetzt sei $F = F_c(1 - \varepsilon) \neq 0$, auf den Balken wird also eine subkritische Kraft ausgeübt. Wir nehmen hier wiederum den Fall der freien RB an, um analytische Ausdrücke zu erhalten, und betrachten sofort lediglich die Fluktuationen in Balkenmitte $s' = s = L/2$. Dann tragen die Moden $n = 2, 4, 6, \dots$ nicht bei und Gl. (1.79) lässt sich ausdrücken als

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{n \text{ odd}} \frac{l_0^2}{n\sqrt{n^2 - 1 + \varepsilon}} \coth\left(\frac{T_0}{2T} n\sqrt{n^2 - 1 + \varepsilon}\right). \quad (1.88)$$

Nahe der kritischen Kraft ($\varepsilon \rightarrow 0$) ergibt sich hier eine Divergenz für den Ausdruck in der ersten Mode. Diese Divergenz ist allerdings unphysikalisch und ist darauf zurückzuführen,

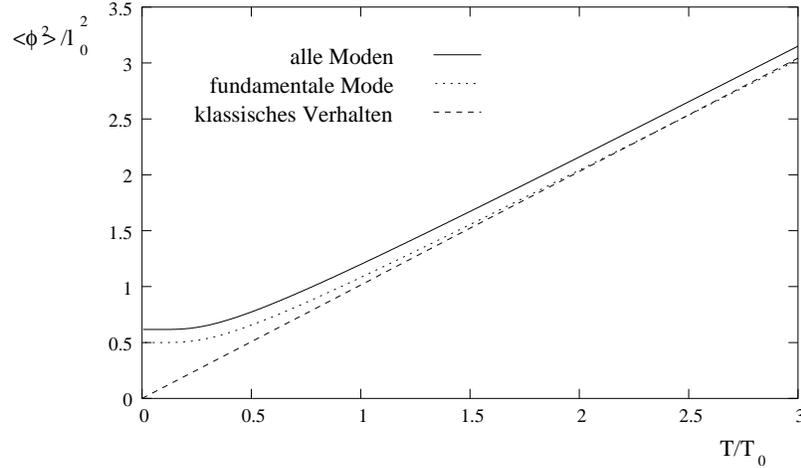


Abbildung 1.6: Mittlere quadratische Auslenkung in Balkenmitte $\phi^2(L/2)$ in Einheiten von l_0^2 . Gezeigt sind die tatsächlichen Beiträge aller Moden (durchgezogene Linie) im Vergleich zur Extrapolation der klassischen Verhaltens zu sehr kleinen Temperaturen (gestrichelte Linie). Außerdem ist der Beitrag der fundamentalen Mode gezeigt (gepunktete Linie), man erkennt, dass sich in diesem Temperaturbereich alle höheren Moden schon quantenmechanisch verhalten (Beitrag von $(\pi^2 - 8)/16$) nach Gl. (1.85).

dass wir hier in quadratischer Näherung gerechnet haben. Sorgfältige Mitnahme höherer Terme in ϕ' in der Lagrangedichte Gl. (1.27) behebt dieses Problem, wie in Kapitel 3 gezeigt wird. Nichtsdestotrotz wird die schon bei $F = 0$ dominante fundamentale Mode das Problem für $F \rightarrow F_c$ allein bestimmen, da die Frequenzen der höheren Moden bei F_c endlich bleiben. Vernachlässigt man also die höheren Moden, so erhält man einen Ausdruck für die quadratische Auslenkung in Balkenmitte aufgrund der ersten Mode

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle_{\varepsilon \rightarrow 0} \simeq \frac{l_0^2}{2} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \coth \left(\frac{T_0}{2T} \sqrt{\varepsilon} \right), \quad (1.89)$$

der nun unabhängig von der Wahl der Randbedingung gilt. Wenn auch der Limes in quadratischer Näherung nicht ausgeführt werden kann, ergibt sich dennoch zumindest ein Übergangsbereich, in dem die Fluktuationen gut durch Gl. (1.89) beschrieben werden. Damit ist eine Möglichkeit gegeben, Quantenfluktuationen durch Kompressionskräfte auf den Balken zu erhöhen, denn diese verhalten sich wie

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle_{\text{qm}} \simeq \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{l_0^2}{2}. \quad (1.90)$$

Allerdings werden in der Nähe der kritischen Kraft $\varepsilon \rightarrow 0$ die thermischen Fluktuationen noch wesentlich stärker erhöht,

$$\langle \phi^2(L/2) \rangle_{\text{cl}} \simeq \frac{l_0^2}{\varepsilon} \frac{T}{T_0}, \quad (1.91)$$

sodass sich die Übergangs-Temperatur $T^*(\varepsilon)$ von klassischem zu quantenmechanischem Verhalten entsprechend verringert, was auch in Abb. 1.7 zu sehen ist:

$$T^*(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon} T_0. \quad (1.92)$$

Durch longitudinale Kompression werden also generell die transversalen Fluktuationen erhöht, jedoch auf Kosten von niedrigeren Temperaturen für das Erreichen des Quantenlimits.

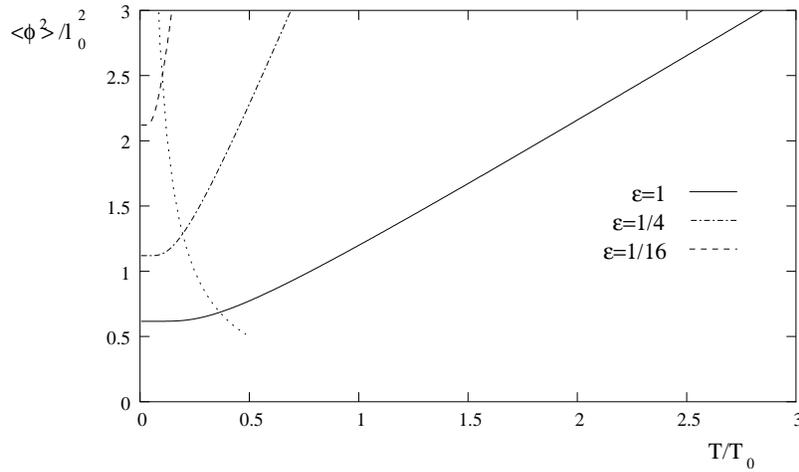


Abbildung 1.7: Mittlere quadratische Auslenkung in Balkenmitte $\phi^2(L/2)$ in Einheiten von l_0^2 für verschiedene Kompressionen $F = 0$, $F = 0.75F_c$, $F = 0.94F_c$. Desweiteren eingezeichnet (gepunktete Linie) ist die Kurve $\{T^*(\varepsilon), \langle \phi^2 \rangle(\varepsilon \rightarrow 0)\}$ welche die erhöhten Quantenfluktuationen bei sinkender Übergangs-Temperatur anzeigt.

1.3 Diskussion und Vergleich mit Experiment

Um die Bedeutung der eben errechneten Ergebnisse für physikalisch realisierbare Nanobalken abzuschätzen, sollen die entsprechenden Skalen ω_0 , l_0 , und T_0 für experimentell relevante Systeme berechnet werden, zum einen Balken aus Carbon-Nanotubes, zum anderen Balken aus dem in der Halbleiter-Fertigung oft verwendeten Silizium [64].

Der folgende Abschnitt enthält eine kurze Einführung in die Physik der Carbon-Nanotubes, da sie erst seit zwölf Jahren bekannt sind und außerordentliche, für unsere Zwecke nützliche Eigenschaften aufweisen. Anschließend werden alle nötigen Zahlenwerte für die Vergleichsbalken bereit gestellt. Schließlich wird kurz auf Messmethoden für die Detektion von Auslenkungen eingegangen und deren Sensitivität bezüglich des benötigten Quantenlimits diskutiert.

1.3.1 Carbon Nanotubes - kleinste Balken

Carbon Nanotubes sind winzige Röllchen aus “aufgerollten” Graphit-ebenen, in denen Kohlenstoff-Atome in einem hexagonalen Gitter mit 1.39 \AA interatomarem Abstand über sp^2 -Bindungen angeordnet sind, siehe Abb. 1.8. Wie unten dargestellt wird, haben sie op-



Abbildung 1.8: Links: Struktur einer Nanotubeschicht [61].

Rechts: Molekular-dynamische Simulation einer solchen Nanotubeschicht unter Belastung [87].

timale elastische Eigenschaften und zusätzlich eine sehr geringe Massendichte, eignen sich also hervorragend als Kandidaten für Nanobalken [75], an denen Quanteneffekte untersucht werden sollen. Es gibt grundsätzlich zwei Typen von Nanotubes. Zum einen Multi-Wall-Nanotubes (MWNTs), die aus mehreren ineinander liegenden solcher Schichten bestehen. Sie wurden mehr oder minder zufällig 1991 gefunden [38]. Zwei Jahre später wurden dann auch Single-Wall-Nanotubes (SWNTs) realisiert, die aus lediglich einem Röllchen bestehen [39, 6]. Neben den mechanischen Eigenschaften sind Nanotubes auch in elektronischer Hinsicht interessante Materialien, da sie sich metallisch, aber auch wie ein Halbleiter verhalten können, da sich abhängig von Durchmesser und Helizität unterschiedliche Bandstrukturen ergeben [75]; die Helizität ist dabei durch die Richtung gekennzeichnet, in der die Graphit-ebene “aufgerollt” ist. Die Bandstruktur selbst kann auch durch mechanische Kräfte manipuliert werden [57]. Alle diese Möglichkeiten lassen vielfältige Anwendungen von Nanotubes zu. Als Beispiel seien hier elektronische Bauelemente wie der “single molecule field effect transistor” [80], Quanten-Drähte [79], mechanische Anwendungen wie AFM-Spitzen [20] genannt, aber auch als Speichermedium für Wasserstoff [21] im Hinblick auf Tanks für das Wasserstoff-getriebene Auto sind Nanotubes interessant.

Mechanische Eigenschaften

Bei der Messung der thermischen mittleren Auslenkung von einseitig eingespannten MWNTs mittels “transmission electron microscopy” (TEM) wurden sehr hohe Werte für den Young-Modul E von $1-5 \text{ TPa}$ festgestellt [81] (über Anwendung von Gl. (1.82), allerdings etwas modifiziert für die entsprechende Randbedingungen $\phi'(0) = \phi(0) = \phi''(L) = \phi'''(L) = 0$); dieser außergewöhnlich hohe Wert (sogar um einen Faktor 10 höher als der von Stahl)

hängt natürlich mit dem sehr hohen “in-plane” E -Modul der Graphit-ebene von etwa 1 TPa zusammen. Ähnliche Werte für E wurden in einem statischen Versuch durch Belastung mittels einer AFM-Spitze in transversaler Richtung festgestellt [86]. Die Gültigkeit der Elastizitätstheorie für Nanotubes wurde von theoretischer Seite durch molekular-dynamische Simulationen verifiziert [87], bis hinab zu Skalen von etwa 10 nm. Dabei reagieren Nanotubes in reversibler Art und Weise auf äußere Kräfte bis zu Längen von wenigen nm, siehe Abb. 1.8, und ändern dabei bei Deformationen über kritische Stärken hinaus sogar ihre Morphologie. Tatsächlich ist es gelungen, MWNTs zwischen zwei AFM-Spitzen zu positionieren [88], was in Abb. 1.9 links zu sehen ist. Dabei konnte festgestellt werden, dass

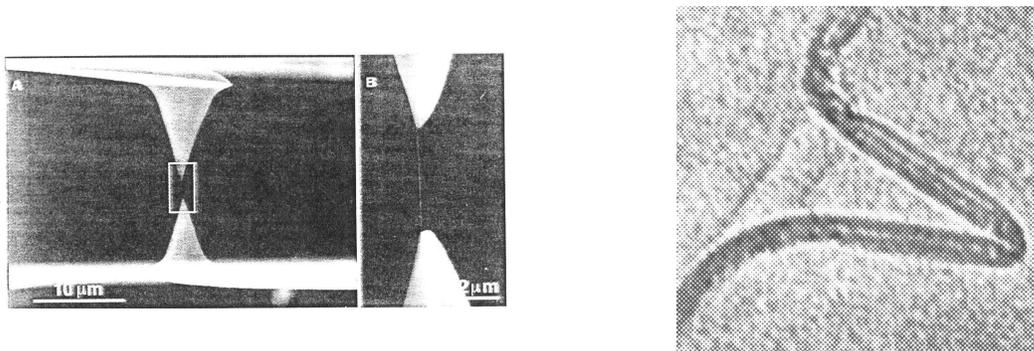


Abbildung 1.9: Links: MWNT zwischen zwei AFM-Spitzen eingeklemmt [23]. Rechts: Euler-Buckling eines MWNT von 10 nm Aussendurchmesser [61].

sich Nanotubes unter longitudinalem Druck “buckeln”, also wie oben (Euler-Instabilität) beschrieben eine seitlich ausgelenkte Form annehmen [23], wobei bei MWNTs das Problem auftreten kann, dass sich die einzelnen Schichten voneinander lösen. In Abb. 1.9 rechts ist ein “gebuckelter” MWNT (in einem Polymer-Film) [61] zu sehen. Desweiteren wurden nicht nur thermische Schwingungen von Nanotubes beobachtet [81], sondern freistehende, einseitig befestigte Nanotubes auch mit elektrisch induzierten Kräften manipuliert [65]. Einerseits wurden Nanotubes statisch verbogen, andererseits aber auch dynamisch in verschiedenen Resonanzfrequenzen angeregt, welche mittels TEM sichtbar gemacht wurden, wie in Abb. 1.10 links zu sehen. Kürzlich ist es schließlich gelungen, SWNTs beidseitig zu befestigen (Abb. 1.10 rechts) und deren thermische Fluktuationen mittels eines “scanning electron microscopes” (SEM) zu beobachten [2]. Dies stellt einen Durchbruch in doppelter Hinsicht dar. Zum einen konnten SWNTs erstmals doppelseitig befestigt werden, zum anderen konnten “richtig kurze” SWNTs von nur bis zu $0.2\mu\text{m}$ Länge im Experiment realisiert werden.

1.3.2 Zahlenwerte

SWNT's

Unser Modell-Balken für diese Arbeit ist ein SWNT von $L = 100$ nm Länge und typischem Durchmesser $D = 1.4$ nm (SWNT besitzen Durchmesser zwischen 1 und 2 nm). Dies erfüllt

$$D \ll L, \quad (1.93)$$

wobei die gewählte Länge kleiner, aber von der Größenordnung von im Experiment realisierten Längen ist [2]. Bei einer Flächen-Massendichte von Graphit $\rho_{\text{Graphit}} = 7.7 \cdot 10^{-7} \text{kg/m}^2$ ergibt sich eine Linien-Massendichte von $\sigma = 3.4 \cdot 10^{-15} \text{kg/m}$, unser Modell-Balken hat also ein Gesamtgewicht von $m = 3.4 \cdot 10^{-22} \text{kg}$. Für die Berechnung des Biege widerstandes $\mu = E \cdot I$ ist es sinnvoll, einen Wert des Young Moduls von $E \simeq 1 \text{TPa}$ anzunehmen, obwohl auch etwas höhere Werte experimentell beobachtet wurden [47]. Die Berechnung der Trägheit der Querschnittsfläche I ist insofern problematisch, als sich Gl. (1.17) für SWNTs als effektiv zweidimensionale Objekte nicht direkt verwenden lässt, und man gezwungen ist, den SWNT als Hohlzylinder mit einer effektiven Wand-dicke $d \ll D$ zu betrachten. Damit besitzt er ein Flächen-Trägheitsmoment von

$$I = \frac{\pi}{64} [(D + d)^4 - (D - d)^4] \simeq \frac{\pi}{8} D^3 d. \quad (1.94)$$

Die Wand-dicke ist prinzipiell schwer abzuschätzen, wir nehmen $d \simeq 5 \cdot 10^{-2} \text{nm}$ an, erhalten so $I \simeq 0.05 \text{nm}^4$ und schließlich einen Biege widerstand von $\mu = 49 \text{GPa nm}^4$, der mit dem im Experiment [2] ermittelten Wert übereinstimmt. Für die im vorherigen Abschnitt definierten Skalen ergeben sich mit diesen Werten eine Frequenzskala von $\omega_0 = 2\pi \cdot 1.4 \text{GHz}$, was einer Temperatur-Skala von $T_0 = 65 \text{mK}$ entspricht, sowie eine Längenskala von $l_0 = 0.010 \text{nm}$.

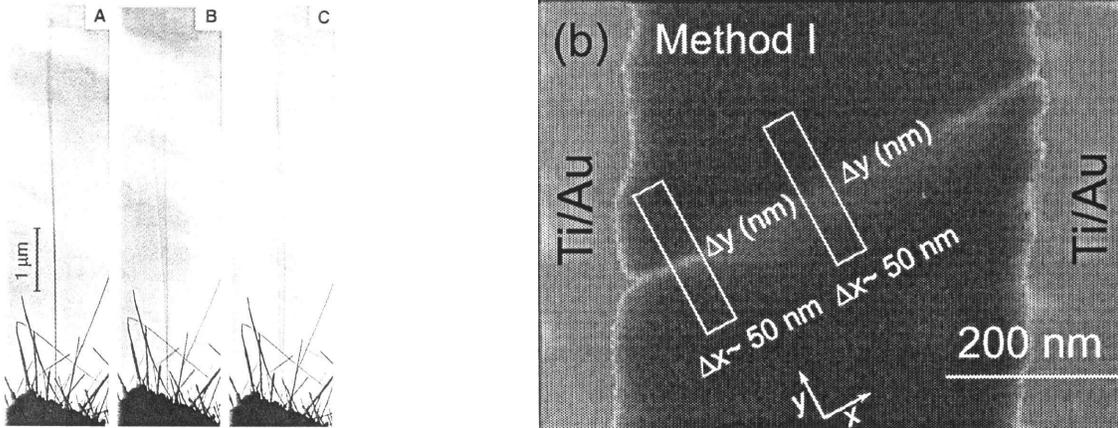


Abbildung 1.10: Links: Thermische Fluktuationen und angeregte Schwingungsmoden eines einseitig befestigten MWNTs [65].

Rechts: Thermische Fluktuationen eines doppelseitig eingespannten SWNTs [2].

MWNTs

MWNTs bestehen aus mehreren aufgerollten Graphit-schichten, wobei jeweils die nächst-obere Schicht die untere im “interlayer” Abstand von $\delta R = 355 \pm 15 \text{pm}$ ummantelt. Sie sind

also durch ihren Aussendurchmesser D_a und ihren Innen-Durchmesser D_i charakterisiert, und enthalten demnach N Schichten, wobei die Beziehung $D_a - D_i = 2(N - 1)\delta R$ gilt. Die k -te Schicht hat also den Durchmesser $D_k = D_i + 2(k - 1)\delta R$ und man erhält für die Massensliniendichte

$$\sigma = \rho_{\text{Graphit}} \sum_k^N \pi D_k = \rho_{\text{Graphit}} \pi N \left(\frac{D_a + D_i}{2} \right) \quad (1.95)$$

Als typischen MWNT wählen wir die $L = 0.5 \mu\text{m}$ lange Variante des Nanotubes Nr. 7 aus Tabelle 1 in [81] mit $D_a = 7 \text{ nm}$, $D_i = 3 \text{ nm}$ und einem Young Modul $E = 1.9 \text{ TPa}$ (was etwa dem ermitteltem Durchschnitt von $\sim 1.8 \text{ TPa}$ der in [81] untersuchten MWNTs entspricht). Damit ergibt sich $\sigma = 8.5 \cdot 10^{-14} \text{ kg/m}$ und eine Gesamt-Balkenmasse von $m = 4.2 \cdot 10^{-20} \text{ kg}$, also etwa ein Faktor 100 mehr als bei unseren SWNTs. Im Fall des MWNT ist es nun korrekt (und konsistent [81]), das Trägheitsmoment der Querschnittsfläche über

$$I = \frac{\pi}{64} (D_a^4 - D_i^4) \simeq 1.1 \cdot 10^2 \text{ nm}^4 \quad (1.96)$$

zu berechnen. Der sich daraus ergebende Biegegewiderstand von $\mu = 2.1 \cdot 10^2 \text{ TPa nm}^4$ wird dann sogar um einen Faktor 4000 höher als der unserer SWNTs; daher erreichen auch MWNTs Frequenzskalen in etwa der gleichen Größenordnung wie SWNTs. Tatsächlich gilt $\omega_0 = 2\pi \cdot 0.72 \text{ GHz}$ und $T_0 = 33 \text{ mK}$, allerdings ist die Längenskala der Quantenfluktuationen $l_0 = 0.0012 \text{ nm}$ nur noch im pm-Bereich.

Si-Balken

Es gelingt inzwischen auch, freitragende Balken aus Halbleiter-Materialien wie Silizium (Si) oder Gallium-Arsenid (GaAs) herzustellen, die Resonanzfrequenzen im Radiofrequenz-Bereich besitzen [64]; erstmals wurde kürzlich sogar ein Resonator im GHz-Bereich gebaut [36], der aus "silicon carbide epilayers" besteht (und damit einen Schritt vom Si-Balken zum Nanotube getan hat), was sich sofort in einem höheren E-Modul und damit in einer erhöhten Resonanzfrequenz bemerkbar macht. In [44] dagegen wird vorgeschlagen, einen $450 \text{ nm} \times 50 \text{ nm} \times 40 \text{ nm}$ großen Balken zu verwenden, mit dem der "Quantenlimes" erreicht werden soll. Wir berechnen also zum Vergleich unsere Skalen für einen Si-Balken dieser Ausmaße, wobei wir der Einfachheit davon ausgehen, dass der Balken nicht weiter beschichtet ist. Trotz eines deutlich geringeren E-Moduls von 0.18 TPa ergibt sich aufgrund des deutlich höheren Flächenträgheitsmoments eine Resonanzfrequenz knapp unter dem GHz-Bereich. Dabei ist zu beachten, dass im Experiment die obige Formel Gl. (1.53) für die Resonanzfrequenz zwar die richtige Größenordnung trifft, der exakte Wert allerdings in schwer beeinflussbarer Weise von der genauen Fabrikation, vor allem der Aufhängepunkte des Balkens abhängt. Diese werden selbst oft zum Teil freitragend und können "mitschwingen" und die Schwingungsfrequenz des Balkens je nachdem sowohl erhöhen als auch erniedrigen [5]. Im günstigsten Fall sind daher Si-Balken im GHz-Bereich sicher möglich, aber aufgrund der nochmal höheren Masse gegenüber MWNTs ergibt sich für die Längenskala lediglich ein Wert von $\sim 10^{-5} \text{ nm}$, nur noch etwa ein tausendstel der Skala des SWNT.

	SWNT	MWNT	Si-Balken	skaliert wie
Länge L [μm]	0.1	0.5	0.45	L
Durchmesser D [nm]	1.4	–	–	$\ll L$
Innen-Durchmesser D_i [nm]	–	3	–	$\ll L$
Aussendurchmesser D_a [nm]	–	7	–	$\ll L$
Breite b [nm]	–	–	50	$\ll L$
Höhe h [nm]	–	–	40	$\ll L$
Massenliniendichte σ [kg/m]	$3.4 \cdot 10^{-15}$	$8.5 \cdot 10^{-14}$	$4.6 \cdot 10^{-10}$	–
effektive Masse m_{eff} [kg]	$1.27 \cdot 10^{-22}$	$1.6 \cdot 10^{-20}$	$7.7 \cdot 10^{-17}$	$\sim L$
Flächen-Trägheit I [nm ⁴]	0.05	110	$4.2 \cdot 10^5$	–
Elastizitätsmodul E [TPa]	1	1.9	0.18	–
Biegemoment μ [TPa nm ⁴]	0.05	210	$7.5 \cdot 10^4$	–
kritische Kraft F_c [nN]	0.2	33	$1.5 \cdot 10^4$	$\sim 1/L^2$
Frequenzskala $\omega_0/2\pi$ [GHz]	1.4	0.72	0.23	$\sim 1/L^2$
Längenskala l_0 [nm]	0.010	0.0012	$3.1 \cdot 10^{-5}$	$\sim \sqrt{L}$
Temperaturskala T_0 [mK]	65	33	11	$\sim 1/L^2$
Qualitätsfaktor* Q	$> 10^4$	$< 10^4$	$\mathcal{O}(10^3)$	–
Sensitivität** $dx/\sqrt{\Delta f}$ [nm/ $\sqrt{\text{Hz}}$]	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-8}$	$\sim L^{3/2}$

Tabelle 1.1: Zahlenwerte für SWNT, MWNT und Si-Balken im Vergleich (ohne Kompression).

* Schätzwerte.

**: Erforderliche Sensitivität zur Messung der Skala l_0 , (in Resonanz und bei Temperatur von 10mK).

1.3.3 Experimentelle Detektion von Auslenkungen

Ein Überblick zur Problematik von Messungen in Quantensystemen findet sich in [8]. Für die konkrete Detektion von kleinsten Auslenkungen stehen mehrere Methoden zur Verfügung. Die schon oben genannten Methoden, TEM mit Visualisierung von $\langle \mathcal{A}^2 \rangle = 10 \text{ (nm)}^2$ [81] oder SEM mit einer Auflösung von $\ll 10 \text{ nm}$ [2], mit optimistisch realistischer Obergrenze von 0.1 nm ist für die ermittelten Skalen l_0 offenbar bei weitem nicht ausreichend. Eine weitere Möglichkeit, zumindest für (mit leitendem Material) beschichtete, magnetomotorisch getriebene Si-Balken, ist die Messung des Powerspektrums (siehe unten) über eine Messung der reflektierten Leistung des Balkens über einen Network-Analyzer [64]. Diese Methode erreicht aber ebenfalls nicht die geforderte Auflösung und ist darüber-hinaus noch nicht auf Nanotubes anwendbar, da die Impedanzanpassung aufgrund des zu hochohmigen Widerstands von Nanotubes noch nicht realisiert werden konnte [5]. Die vielversprechendste Möglichkeit besteht in einer kapazitiven Kopplung des Nanobalkens an einen hochsensitiven Elektrometer. Dabei wird die Kapazität der Kopplung eine Funktion des Abstandes von Balken und Elektrometer (siehe auch Kapitel 3), und die Anordnung kann auch zur Detektion von kleinsten Auslenkungen verwendet werden. So hat zum Beispiel ein freitragender Quantendot [43], auf einem schwingenden Nanobalken aufgesetzt,

eine theoretisch zu erwartende Sensitivität von

$$\frac{dx}{\sqrt{\Delta f}} = 2.9 \cdot 10^{-3} \frac{\text{nm}}{\sqrt{\text{Hz}}}. \quad (1.97)$$

Für einen gekoppelten “single electron transistor” (SET) werden sogar Sensitivitäten von $dx/\sqrt{\Delta f} = 3 \cdot 10^{-6} \text{nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ berechnet [7]. Kürzlich erst wurde zum ersten Mal eine Auslenkungsmessung mittels SET realisiert [44]. Dabei wurde für einen 116 MHz-GaAs-Resonator bei 30 mK eine Sensitivität von $dx/\sqrt{\Delta f} = 2 \cdot 10^{-6} \text{nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ realisiert. Die Autoren sind optimistisch, in einer verbesserten Version sogar $dx/\sqrt{\Delta f} = 1 \cdot 10^{-8} \text{nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ zu erreichen. Die Umrechnung von tatsächlichen mittleren Auslenkungsquadraten $\langle \mathcal{A}^2 \rangle$ und den in $\text{nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ angegebenen Sensitivitäten erfolgt über die Wurzel des Powerspektrums des Resonators.

Powerspektrum

Mittlere Auslenkungsquadrate werden in dynamischen Experimenten über Messungen von deren Fouriertransformierten, dem Powerspektrum bestimmt. Wir beschränken uns im Folgenden lediglich auf die fundamentale Mode, um einerseits die Darstellung zu vereinfachen; aber auch weil, wie oben gesehen, das gesamte mittlere Auslenkungsquadrat in Balkenmitte in guter Näherung durch Fluktuationen dieser Mode bestimmt ist. Wir erhalten also

$$C_+(L/2, L/2, t) \longrightarrow C_+(t) \equiv \langle \mathcal{A}_1(t) \mathcal{A}_1(0) \rangle \quad (1.98)$$

als mittleres Auslenkungsquadrat, wobei $C_+(t=0) = l_0/2 \cdot \coth(\beta \hbar \omega_0/2)$ das Ergebnis der Fluktuationen ohne Berücksichtigung von Dämpfungseffekten war. An dieser Stelle muss kurz diskutiert werden, welche die wirklich physikalisch relevante Korrelationsfunktion ist: Das Powerspektrum wird in der Literatur generell mit $\tilde{S}(\omega)$ bezeichnet. Andererseits definiert man $\tilde{S}(\omega)$ als Fouriertransformierte

$$\tilde{S}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \frac{1}{2} (C_+(t) + C_-(t)) \quad (1.99)$$

der symmetrisierten Korrelationsfunktion [40]

$$S(t) \equiv \frac{1}{2} (\langle \mathcal{A}_1(t) \mathcal{A}_1(0) \rangle - \langle \mathcal{A}_1(0) \mathcal{A}_1(t) \rangle) \quad (1.100)$$

(es ist analog $C_-(t) \equiv \langle \mathcal{A}_1(0) \mathcal{A}_1(t) \rangle$). Klassisch gibt es natürlich keinen Unterschied zwischen $\tilde{S}(\omega)$ und der Fouriertransformation $\tilde{C}(\omega)$ der nicht symmetrisierten Auslenkung,

$$\tilde{C}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} C_+(t) \quad (1.101)$$

da die Amplituden vertauschen und $C_+(t) = C_-(t)$ gilt. Im quantenmechanischen Fall stellt sich heraus, dass $S(t)$ zwar wichtig für die formale Behandlung von Korrelationsfunktionen

im Allgemeinen ist, die physikalisch relevante Korrelationsfunktion aber durch $C_+(t)$ gegeben ist, wie auch im Zusammenhang von “shot-noise” in Strom-Strom-Korrelationsfunktionen gezeigt wurde [29, 55]. Mit “Powerspektrum” meinen wir also in folgendem Zusammenhang $\tilde{C}(\omega)$.

Wir berücksichtigen nun Dämpfungseffekte in Form von Ohmscher Dämpfung über den Qualitätsfaktor Q des Balken-Resonators, der durch den Quotient aus Schwingungsenergie und pro Schwingzyklus dissipierter Energie definiert ist und der für $Q \gg 1$ durch den Ausdruck $Q = \omega_0/\gamma$ gegeben ist. In der klassischen Bewegungsgleichung des Resonators erhält man also

$$m_{\text{eff}}\ddot{\mathcal{A}}_1 + m_{\text{eff}}\frac{\omega_0}{Q}\dot{\mathcal{A}}_1 + m_{\text{eff}}\omega_0^2\mathcal{A}_1 = K_{\text{ext}}(t) \quad (1.102)$$

mit einer eingefügten (beliebigen) äußeren Kraft $K_{\text{ext}}(t)$. Das Powerspektrum selbst wird über das Fluktuations-Dissipations Theorem bestimmt, was im Frequenzraum

$$\tilde{C}(\omega) = \frac{\hbar}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}\tilde{\chi}''(\omega) \quad (1.103)$$

lautet. Hier ist $\tilde{\chi}''(\omega)$ der Imaginärteil der Fouriertransformierten der retardierten, temperaturabhängigen Greensfunktion

$$\tilde{\chi}(\omega) = \int dt e^{+i\omega t} \frac{i}{\hbar} \Theta(t) (C_+(t) - C_-(t)). \quad (1.104)$$

Die physikalische Bedeutung von $\chi(t)$ ist die Response-Funktion der linearen Antwort-Theorie, über die mittels

$$\mathcal{A}_1(t) = \int_{-\infty}^t dt' \chi_{\text{cl}}(t-t')K_{\text{ext}}(t') \quad (1.105)$$

die klassische lineare Antwort des Systems auf eine äußere Kraft berechnet wird. Für unseren Resonator Gl. (1.102) ergibt sich sofort durch Fouriertransformation

$$\tilde{\chi}_{\text{cl}}(\omega) = \frac{1}{m_{\text{eff}}} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\omega_0\omega/Q}. \quad (1.106)$$

Da für den harmonischen Oszillator die quantenmechanische und die klassische Response-Funktion identisch ist, kann man in Gl. (1.103) die klassische Response-Funktion $\tilde{\chi}_{\text{cl}}(\omega)$ zu verwenden. Damit ergibt sich schließlich für das Powerspektrum

$$\tilde{C}(\omega) = \frac{\hbar}{m_{\text{eff}}} \frac{\omega_0\omega/Q}{\left[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega_0\omega/Q)^2\right]} \frac{1}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}. \quad (1.107)$$

Um mit den Sensitivitäten der experimentellen Messmethoden zu vergleichen, muss die Wurzel des Powerspektrums, ausgewertet an der Resonanzfrequenz und bei Temperatur des Experiments, $T = T_{\text{exp}}$, hergenommen werden:

$$\sqrt{\tilde{C}(\omega = \omega_0, T = T_{\text{exp}})} = \sqrt{\frac{1}{2\pi} \frac{Q}{\omega_0/2\pi [\text{Hz}]} \left[1 - \exp\left(-\frac{T_0}{T_{\text{exp}}}\right)\right]^{-1}} l_0 [\text{nm}] \frac{\text{nm}}{\sqrt{\text{Hz}}}. \quad (1.108)$$

Nimmt man $T_{\text{exp}} = 10 \text{ mK}$ an und setzt die Werte für $\omega_0/2\pi$ und l_0 aus Tab. 1.1 ein, so erhält man $1.1 \cdot 10^{-5} \text{ nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ für unseren SWNT, $1.2 \cdot 10^{-6} \text{ nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ für den MWNT und $3.6 \cdot 10^{-8} \text{ nm}/\sqrt{\text{Hz}}$ für einen Si-Balken, der die in [44] für ein geplantes, noch sensitiveres Folge-Experiment vorgeschlagenen Ausdehnungen besitzt.

1.3.4 Diskussion

Der experimentelle Zugang zum Nachweis von Quantenfluktuationen ist im wesentlichen von zwei Faktoren abhängig. Zum einen muss man das System ausreichend herunter kühlen können, um den Übergangsbereich $T \simeq T_0$ bzw. um reine Quantenfluktuationen bei $T \ll T_0$ beobachten zu können. Zum anderen müssen die Fluktuationen dann natürlich noch detektiert werden können, also darf $\langle \phi^2(L/2) \rangle$ nicht zu klein werden. Beide Bedingungen bedeuten, dass die Masse des verwendeten Balkens klein bzw. \hbar/m_{eff} möglichst groß sein soll. Was die Temperatur betrifft, so können mit Standardverfahren $T \ll 0.1 \text{ K}$ erreicht werden, mit Grenzbereich von etwa $T \sim 7 \text{ mK}$ [5] für handelsübliche 3He-4He -Entmischungskryostate. Damit sind die Frequenzen aller oben aufgeführten Nanobalken groß genug, um $T < T_0$ zu gewährleisten, und man befindet sich mit allen Systemen, SWNT, MWNT und Si-Balken “im Quantenlimes”. Dies hat allerdings erst dann eine Bedeutung, wenn die dominanten Nullpunkts-Fluktuationen auch detektierbar sind. Hier kommt eigentlich nur der SWNT mit $l_0 = 0.01 \text{ nm}$ in Betracht, was eine Größenordnung kleiner ist, als man mit dem SEM detektieren kann. Andererseits erfordert dies vom Powerspektrum her eine Sensitivität von $\sim 10^{-5} \text{ nm}/\sqrt{\text{Hz}}$, die mittels SET erreichbar scheint, wenn es technisch gelingt, eine Anordnung wie in [2] mit der in [44] verwendeten Messtechnik zu kombinieren. Was die MWNTs bzw. Miniatur Si-Balken betrifft, so scheiden sie realistischerweise aufgrund ihrer viel höheren Masse aus.

Aufgrund der offensichtlichen Schwierigkeit einer experimentellen Realisierung mit hinreichend sensibler Detektionsmethode in Kombination mit der Einspannung von SWNTs liegt es nahe, nach einer Möglichkeit zu suchen, die Fluktuationen zu verstärken. Eine Möglichkeit hierzu ist die Anwendung einer longitudinalen Kompressionskraft, wie in Gl. (1.90) und Abb. 1.7 gesehen. Diese Idee wird in Kapitel 3 wieder aufgegriffen. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, das Phänomen der parametrischen Resonanz zu nutzen, um Fluktuationen dynamisch zu verstärken, was im folgenden Kapitel 2 behandelt wird.

Kapitel 2

Verstärkung von Fluktuationen durch parametrische Resonanz

Wir hatten gesehen, dass man Nanobalken in guter Näherung durch einen harmonischen Oszillator beschreiben kann, dessen Koordinate durch die Auslenkung in Balkenmitte gegeben ist. In diesem Kapitel wollen wir dynamische Anregungen des Oszillators untersuchen, um zu sehen ob sich dadurch Fluktuationen, insbesondere die sehr kleinen Nullpunkts-Fluktuationen, erhöhen lassen. Zunächst ist klar, dass die Auslenkungen eines Oszillators stationär stark erhöht werden können, wenn dieser von einer zeitabhängigen, externen Kraft mit einer Frequenz getrieben wird, die der Eigenfrequenz des Oszillators entspricht. Dies ist die gewöhnliche Resonanz; sie kann zu ungewöhnlichen Resonanz-Katastrophen führen (Abb. 2.1). Generell sind diese gewöhnlichen Resonanz-Effekte sowohl durch Dämpfung, als auch durch anharmonische Terme im Potential eingeschränkt. Hier wollen wir allerdings eine andere Art von Resonanz betrachten, die durch eine zeitliche Modulation des harmonischen Potentials selbst hervorgerufen wird, die “parametrische Resonanz” [1]. Das einfachste Beispiel für einen solchen parametrischen Antrieb ist ein Kind auf einer Schaukel, welches durch Verlagerung seines Schwerpunktes die effektive Schaukel-Länge und damit die effektive Schwingfrequenz im Potential periodisch variiert. Wir untersuchen also den parametrischen Oszillator zunächst klassisch, und dann im zweiten Abschnitt mit quantenmechanischen Methoden.

2.1 Klassischer parametrischer Oszillator

Wir präsentieren kurz die klassische Theorie des parametrischen Oszillators, zeigen, wie sich dessen Grund-Gleichung im Experiment realisieren lässt, geben die allgemeine Lösung an und betrachten insbesondere eine Näherungslösung im Vergleich zur Darstellung [71], wo parametrische Resonanz im Experiment nachgewiesen wurde. Es folgt noch eine Erweiterung dieser Näherung in nächsthöherer Ordnung.

Die folgende Darstellung ist für einen Oszillator der Masse m mit Auslenkungsordinate x und Eigenfrequenz ω_0 , bezüglich Kapitel 1 setzen wir also vereinfachend $\mathcal{A}_1 \rightarrow x$ und



Abbildung 2.1: Links: Intakte Tacoma Narrows Bridge
 Rechts: Zerstörte Tacoma Narrows Bridge, nachdem sie durch Wind zunächst in transversale und schließlich torsionale Resonanz-Schwingung versetzt wurde, bis die Konstruktion nachgab [60].

$m_{\text{eff}} \rightarrow m$. Wir führen nun einen parametrischen Antrieb ein derart, dass das harmonische Potential

$$V(x, t) = \frac{1}{2} m \omega_P^2(t) x^2 \quad (2.1)$$

nun über die Frequenz zeitabhängig wird, wobei die Frequenz durch

$$\omega_P^2(t) = \omega_0^2 [1 + \varepsilon \cos(\Omega_P t + \theta)] \quad (2.2)$$

definiert ist, d.h. sie besteht im Wesentlichen aus der Grundfrequenz, die von einer kleinen periodischen Modulation überlagert ist. Hierbei ist ε ein kleiner, dimensionsloser Parameter, der die Stärke dieser Modulation bestimmt (und hat insbesondere nichts mit dem ε aus Kapitel 1 zu tun, hier spielt die dortige kompressive Kraft keine Rolle). In Anwesenheit einer zugeschalteten externen Kraft

$$K_{\text{ext}}(t) = K \cos(\Omega t + \psi) \quad (2.3)$$

lautet die klassische Bewegungsgleichung des äußerlich getriebenen parametrischen Oszillators

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} + m\omega_P^2(t)x = K \cos(\Omega t + \psi). \quad (2.4)$$

Als parametrische Resonanz bezeichnet man nun den Fall

$$\Omega_P = 2\omega_0 \quad (2.5)$$

(Kind auf Schaukel), wofür sich durch Frequenz-Mischungen in der Fouriertransformierten der Lösung Resonanzen ergeben werden.

Prinzipielle experimentelle Realisierung

Eine mögliche Realisierung der Bewegungsgleichung (2.4) ist durch eine zweifache kapazitive Kopplung an den Balkenoszillator [16] (Kondensatorplatten rechts und links senkrecht

zur Auslenkungsrichtung). Treibt man die Anordnungen mit Spannungen $U_R(t)$ bzw. $U_L(t)$ ergibt sich eine zusätzliche Energie

$$\mathcal{E}_{\text{el}}(t) = \frac{1}{2}C_R U_R^2(t) + \frac{1}{2}C_L U_L^2(t) \quad (2.6)$$

mit den Kapazitäten $C_{R,L}$. Diese hängen vom Abstand der Kondensatorplatten zum Balken ab. Eine genauere, der Geometrie des Systems angemessene Berechnung der Kapazität findet sich in Kapitel 3. Für das Prinzip ist es aber ausreichend, eine Entwicklung der Kapazitäten um die Ruhe-Lage $x = 0$ des Balkens zu betrachten,

$$C_{R,L}(x) = C_{R,L}(0) + C'_{R,L}(0) \cdot x + \frac{1}{2}C''_{R,L}(0) \cdot x^2. \quad (2.7)$$

In der Bewegungsgleichung des Balkens

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = -\frac{\partial}{\partial x}\mathcal{E}_{\text{el}}(x, t) \quad (2.8)$$

treten in dieser Näherung dann sowohl eine äußere Kraft,

$$-\frac{1}{2}[C'_R(0)U_R^2(t) + C'_L(0)U_L^2(t)] \equiv K_{\text{ext}}(t), \quad (2.9)$$

als auch ein zusätzlicher Term proportional zu x auf, der die Frequenz moduliert

$$-\frac{1}{2}[C''_R(0)U_R^2(t) + C''_L(0)U_L^2(t)] \equiv -\varepsilon m\omega_0^2 \cos(\Omega_P t + \theta), \quad (2.10)$$

womit die Modell-Gleichung (2.4) für eine konkrete Realisierung hergeleitet ist. Damit können mit entsprechender Wahl von $U_{R,L}(t)$ sowohl die externe Kraft als auch der parametrische Antrieb im Prinzip unabhängig modelliert werden.

2.1.1 Allgemeine Lösung und Stabilität

Der Charakter (u.a. die Stabilität) der Lösung wird von der Wahl der Parameter γ, ε abhängen. Um dies zu zeigen, wollen wir vorher zu dimensionslosen Größen übergehen, indem die Zeit in Einheiten der inversen Frequenz $(\omega_0)^{-1}$ und alle auftretenden Frequenzen sowie γ in Einheiten von ω_0 skaliert werden. Zeitableitungen der Koordinate erhalten damit einen Faktor ω_0 . Die Koordinate x selbst wird im Hinblick auf eine spätere Erweiterung der klassischen Theorie zur Quantentheorie schon in Einheiten der Oszillatorlänge l_0 mit $l_0^2 = \hbar/m\omega_0$ dargestellt. In den dimensionslosen getildeten (\tilde{G}) Größen lautet Gl. (2.4) dann

$$\frac{\partial^2}{\partial \tilde{t}^2} \tilde{x} + \tilde{\gamma} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{x} + (1 + \varepsilon \cos(2\tilde{t} + \theta)) \tilde{x} = g \cos(\tilde{\Omega} \tilde{t} + \psi), \quad (2.11)$$

wobei die dimensionslose äußere Kraft $g = K/ml_0\omega_0^2$ physikalisch natürlich eine klassische Kraft ist, die nur aufgrund der Einführung der quantenmechanischen Längenskala formal in einer quantenmechanischen Skala erscheint. Schließlich lassen wir der einfacheren Schreibweise halber die Tilden weg und erhalten

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + (1 + \varepsilon \cos(2t + \theta)) x = g \cos(\Omega t + \psi). \quad (2.12)$$

Allgemeine Lösung der homogenen Gleichung

Betrachten wir zunächst nur die homogene Gleichung, Gl. (2.12) mit $g = 0$,

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_p^2(t)x = 0, \quad (2.13)$$

welche sich durch die Substitution $x = y \exp\{-\gamma t/2\}$ in die Form der Mathieu'schen Differentialgleichung [42]

$$\ddot{y} + \omega^2(t)y = 0 \quad (2.14)$$

bringen lässt mit der dimensionslosen, zeitabhängigen Frequenz

$$\omega^2(t) = 1 - \frac{\gamma^2}{4} + \varepsilon \cos(2t + \theta). \quad (2.15)$$

Die Mathieu'sche Differentialgleichung besitzt zwei linear unabhängige Lösungen [42]

$$y_{\pm}(t) = \eta(\pm(t + \theta/2)) \exp\{\pm 2\mu(t + \theta/2)\}, \quad (2.16)$$

wobei die Funktion η lediglich π -periodisch ($\eta(t + \pi) = \eta(t)$) sein muss, und μ der charakteristische Exponent ist. Für den normalen harmonischen Oszillator ($\varepsilon = 0$) bestehen die bekannten Relationen

- $\eta = 1$, $\mu = \frac{i}{2} \sqrt{\left(1 - \frac{\gamma^2}{4}\right)}$ für $\frac{\gamma^2}{4} < 1$,
- $\eta = 1$, $\mu = -\frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\gamma^2}{4} - 1\right)}$ für $\frac{\gamma^2}{4} \geq 1$.

Im Weiteren ist es günstig, ein Fundamental-System ϕ_1, ϕ_2 von (2.14) mit festen Anfangsbedingungen zu wählen:

$$\begin{aligned} \phi_1(0) &= 0, & \phi_2(0) &= 1, \\ \dot{\phi}_1(0) &= 1, & \dot{\phi}_2(0) &= 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

wobei die θ -Abhängigkeit im weiteren nicht mehr explizit angegeben wird. Die Lösungen $\phi_{1,2}$ sind mit dem Runge-Kutta-Verfahren numerisch einfach zu berechnen [67], und die Wronski-Determinante für dieses System ist

$$W_{\phi}(t) = \dot{\phi}_1(t)\phi_2(t) - \dot{\phi}_2(t)\phi_1(t) = 1 \quad (2.18)$$

Stabilitätskriterium

Der charakteristische Exponent μ bestimmt das Langzeitverhalten bzw. die Stabilität der Lösung. Aufgrund von

$$x(t) = (C_+ y_+(t) + C_- y_-(t)) \exp\{-\gamma t/2\} \quad (2.19)$$

mit geeigneten Konstanten C_{\pm} ergeben sich die folgenden Stabilitätskriterien:

- $|\operatorname{Re}\mu| < \gamma/4$: exponentiell abklingende Lösung, stabil
- $|\operatorname{Re}\mu| > \gamma/4$: exponentiell ansteigende Lösung, instabil
- $|\operatorname{Re}\mu| = \gamma/4$: reine Oszillation

Dabei hängt μ selbst nicht von der Verschiebung θ ab. Für $\theta = 0$ lässt sich ϕ_2 durch

$$\phi_2(t) = \frac{1}{2} (y_+(t) + y_-(t)) \quad (2.20)$$

ausdrücken (wobei man $\eta(0) \equiv 1$ normiert hat). Dies liefert aufgrund der Periodizität von η die Bestimmungsgleichung für μ ,

$$\cosh(2\pi\mu) = \phi_2(\pi), \quad (2.21)$$

woraus man sofort zu jeder Dämpfung γ eine kritische Stärke ε_c der Frequenzmodulation aus der numerischen Lösung ϕ_2 durch

$$\phi_2(\pi; \gamma, \varepsilon_c, \theta = 0) = \cosh\left(\frac{\pi\gamma}{2}\right) \quad (2.22)$$

erhält. Dabei ergibt sich in etwa

$$\varepsilon_c \simeq 2\gamma, \quad (2.23)$$

siehe auch Abb. 2.5 weiter unten. In Abb. 2.2 sind einige zeitliche Verläufe des Oszillators ohne äußere Kraft angegeben. Obwohl wir für das reale System Nanobalken deutlich bessere Qualitätsfaktoren haben, verwenden wir im Folgenden eine Dämpfung von $\gamma = 0.4$, um die Ergebnisse besser graphisch darzustellen, es geht hier auch mehr um das Prinzip der parametrischen Resonanz als um Zahlenwerte. Man erkennt, dass für $\varepsilon \leq \varepsilon_c$ der parametrische Antrieb den Oszillator trotz relativ starker Dämpfung am Schwingen hält und für $\varepsilon > \varepsilon_c$ in die Resonanz treibt. Die Winkelverschiebung θ beeinträchtigt zwar das Stabilitätskriterium nicht, moduliert aber die Amplitude der Auslenkung im subkritischen Bereich $\varepsilon \leq \varepsilon_c$ bis hin zum “squeezing”, also zur maximalen Unterdrückung der Auslenkung. Man erkennt darin also auch eine weitere Möglichkeit der parametrischen Resonanz, nämlich die Fluktuationen zu minimieren anstatt sie, wie beabsichtigt, zu verstärken. Sobald man allerdings die kritische Stärke ε_c überschreitet, wird das Squeezing durchbrochen und die instabile, exponentiell anwachsende Lösung setzt sich durch. Die absoluten Werte der Phasenwinkel θ, ψ , bei denen Squeezing auftritt, hängen von der Wahl der Anfangsbedingungen x_0, v_0 ab (siehe unten). In dieser Arbeit ist $x_0 = 1$ und $v_0 = 0$ gewählt, woraus sich für Squeezing der Winkel $\theta = \pi/4$ ergibt. Eine Darstellung der Universalität einiger Aspekte von Squeezing gerade im Zusammenhang der Phasen-Abhängigkeit und Skalierung mit der Dämpfung (bei schwacher Dämpfung) ist in [78] gegeben.

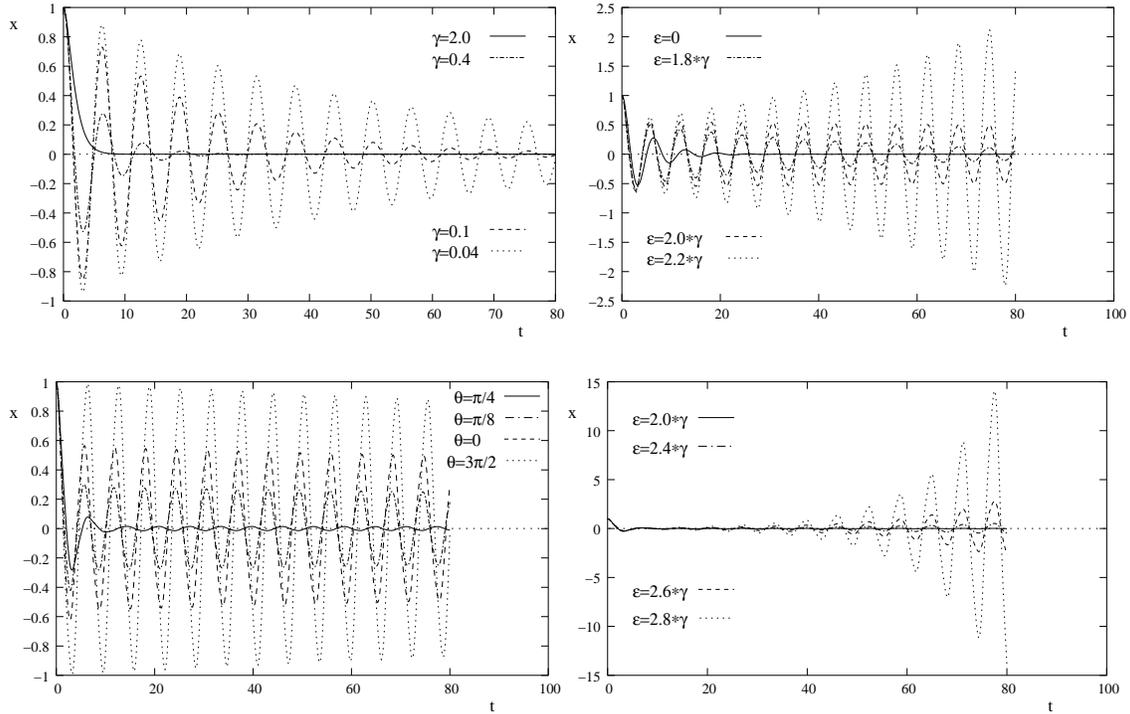


Abbildung 2.2: Verhalten des klassischen parametrischen Oszillators noch ohne äußeren Antrieb ($g = 0$). Links oben: Abklingverhalten des Oszillators noch ohne parametrischen Antrieb ($\varepsilon = 0$) für verschiedene Dämpfungen $\gamma = \{0.04, 0.1, 0.4, 2.0\}$. Rechts oben: Einschalten des parametrischen Antriebs $\varepsilon = \{0, 1.8\gamma, 2\gamma, 2.2\gamma\}$ bei festgehaltenem $\gamma = 0.4$, ebenfalls $\theta = 0$. Links unten: Fast kritischer ($\varepsilon = 2\gamma \simeq \varepsilon_c$) parametrischer Oszillator ($\gamma = 0.4$) für verschiedene Winkel $\theta = \{0, \pi/8, \pi/4, 3/2\pi\}$; Squeezing für $\theta = \pi/4$. Rechts unten: Für über-kritischen parametrischen Antrieb $\varepsilon = \{2.4\gamma, 2.6\gamma, 2.8\gamma\}$ mit $\gamma = 0.4$ überlebt Squeezing ($\theta = \pi/4$) nicht.

Lösung mit äußerer Kraft

Zunächst kann man aus den ϕ_i 's mittels

$$f_i = \phi_i \exp\{-\gamma t/2\} \quad (2.24)$$

ein Fundamental-System von Gl. (2.13) mit den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} f_1(0) &= 0, & f_2(0) &= 1, \\ \dot{f}_1(0) &= 1, & \dot{f}_2(0) &= -\gamma/2 \end{aligned} \quad (2.25)$$

gewinnen, das seinerseits die Wronski Determinante

$$W(t) = \dot{f}_1(t)f_2(t) - \dot{f}_2(t)f_1(t) = \exp\{-\gamma t\} \quad (2.26)$$

hat. Dann lautet die allgemeine Lösung der ursprünglichen inhomogenen Gleichung (2.12) nach [42]

$$x(t) = C_1 f_1(t) + C_2 f_2(t) + G(t) \quad (2.27)$$

mit zwei Konstanten C_1, C_2 und

$$G(t) = f_1(t) \int_{-\infty}^t dt' \frac{f_2(t')g(t')}{W(t')} - f_2(t) \int_{-\infty}^t dt' \frac{f_1(t')g(t')}{W(t')} \quad (2.28)$$

wobei $g(t) = g \cos(\Omega t + \psi)$ ist. Definiert man als Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} x(0) &= x_0, \\ \dot{x}(0) &= v_0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

und berücksichtigt $G(0) = 0 = \dot{G}(0)$, so lautet die vollständige klassische Lösung des parametrischen Oszillators Gl. (2.12)

$$x(t) = \left(v_0 + \frac{\gamma}{2} x_0 \right) f_1(t) + x_0 f_2(t) + G(t). \quad (2.30)$$

In Abb. 2.3 sind einige Auswirkungen des äußeren Antriebs in Resonanz ($\Omega = 1$) gezeigt.

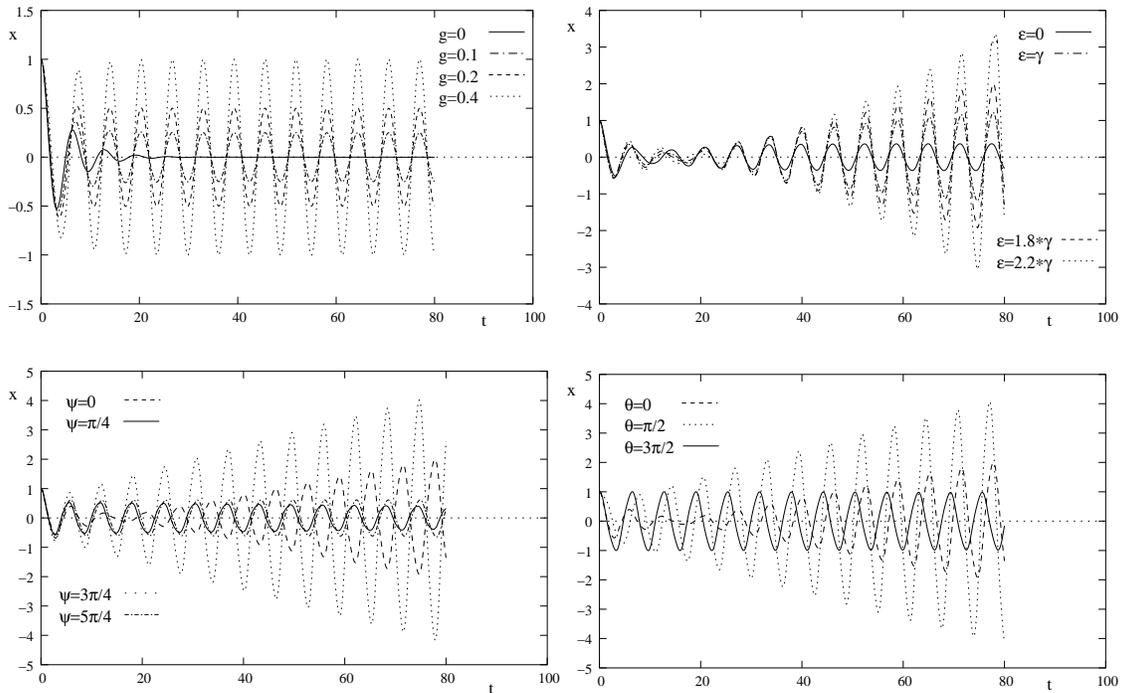


Abbildung 2.3: Extern angetriebener Oszillator mit Dämpfung $\gamma = 0.4$. Links oben: Extern angetriebener $g = \{0, 0.1, 0.2, 0.4\}$, $\psi = 0$ normaler ($\varepsilon = 0$) Oszillator. Rechts oben: Extern $g = 0.1$ und parametrisch angetriebener $\varepsilon = \{0, \gamma, 1.8\gamma, 2.2\gamma\}$ Oszillator, $\psi = 0$ und $\theta = 0$. Links unten: Äußerlich ($g = 0.1$) und parametrisch quasi-kritisch $\varepsilon = 2\gamma \simeq \varepsilon_c$ angetriebener Oszillator mit $\theta = 0$, für verschiedene $\psi = \{0, \pi/4, 3/4\pi, 5/4\pi\}$. Squeezing bei $\psi = \pi/4, 5\pi/4$. Rechts unten: Äußerlich ($g = 0.1$) und parametrisch quasi-kritisch $\varepsilon = 2\gamma$ angetriebener Oszillator, diesmal für $\psi = 0$ und verschiedene $\theta = \{0, \pi/2, 3/2\pi\}$. Hier ebenfalls kein Einfluss des äußeren Antriebs auf Squeezing, welches allerdings im Vergleich zu Abb. 2.2 zu $\theta = 3/2\pi$ verschoben ist.

Während die Auslenkung ohne parametrischen Antrieb konstant bleibt, genügt für $\varepsilon < \varepsilon_c$ schon ein geringe äußere Kraft, um die Amplituden linear ansteigen zu lassen, ein exponentieller Anstieg ergibt sich wiederum für $\varepsilon > \varepsilon_c$. Der lineare Amplitudenanstieg kann in bestimmten Winkel-Konstellationen θ, ψ unabhängig vom externen Antrieb unterdrückt werden (Squeezing), was man gut anhand der folgenden Näherungslösung sehen kann.

2.1.2 Partikuläre Näherungslösung

Jetzt geht es um eine analytisch gewonnene Darstellung einer partikulären Näherungslösung von (2.12) im Fall $\Omega = 1$ (äußerer Antrieb in Resonanz),

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_P^2(t)x = g \cos(t + \psi), \quad (2.31)$$

welche die wesentlichen Elemente der tatsächlichen Lösung enthalten soll. Eine ähnliche Rechnung, bei der nicht ganz übersichtlich ist, wann genähert wird, insbesondere wenn höhere Harmonische weggelassen werden, findet sich in [71] als Erklärung der Messung von parametrischer Resonanz eines "microcantilever", siehe unten. Hier wird die Lösung mittels der Methode der Fouriertransformation

$$x(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt x(t) \exp\{-i\omega t\} \quad (2.32)$$

gewonnen. Dabei wird für das auftretende Produkt $\omega_\varepsilon^2(t) \cdot x(t)$ das Faltungstheorem der Fouriertransformation,

$$\omega_P^2(t)x(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \exp\{i\omega t\} \int d\omega' \omega_P^2(\omega - \omega')x(\omega'), \quad (2.33)$$

verwendet, und man erhält die fouriertransformierte Gleichung (2.31) durch

$$-\omega^2 x(\omega) + i\gamma\omega x(\omega) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega' \omega_\varepsilon^2(\omega - \omega')x(\omega') = g(\omega). \quad (2.34)$$

Die Periodizität der Funktionen $g(t)$, $\omega_P^2(t)$ garantiert die Proportionalität ihrer Fouriertransformierten zu δ -Funktionen, sodass sich auch $x(\omega)$ in einer Reihe von Deltafunktionen darstellen lässt,

$$x(\omega) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} c_\nu \delta(\omega - \nu), \quad c_\nu = c_{-\nu}^*, \quad (2.35)$$

was dem Übergang von obigem Fourierintegral Gl. (2.32) zur Fouriersumme gleichkommt. Damit kann das Faltungsintegral aufgelöst werden, und man erhält

$$\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \left[(-\nu^2 + 1 + i\gamma\nu)c_\nu + \frac{\varepsilon}{2} (e^{i\theta} c_{\nu-2} + e^{-i\theta} c_{\nu+2}) - \frac{g}{2} \sqrt{2\pi} (e^{i\psi} \delta_{\nu,1} + e^{-i\psi} \delta_{\nu,-1}) \right] \delta(\omega - \nu) = 0. \quad (2.36)$$

Die Lösung des Problems kann nun durch die sukzessive Bestimmung der c_ν Ordnung für Ordnung analytisch berechnet werden.

1. Ordnung

Wir betrachten in 1. Ordnung nur die Koeffizienten c_1, c_{-1} als von Null verschieden und erhalten als Gleichung für $c_1 = c'_1 + ic''_1$

$$i\gamma(c'_1 + ic''_1) + \frac{\varepsilon}{2}e^{i\theta}(c'_1 - ic''_1) = \frac{g}{2}\sqrt{2\pi}e^{i\psi}, \quad (2.37)$$

deren Lösung durch

$$\begin{aligned} c'_1 &= \frac{g}{2}\sqrt{2\pi}\frac{\gamma \sin \psi - \varepsilon/2 \cos(\theta - \psi)}{\gamma^2 - \varepsilon^2/4} \\ c''_1 &= -\frac{g}{2}\sqrt{2\pi}\frac{\gamma \cos \psi + \varepsilon/2 \sin(\theta - \psi)}{\gamma^2 - \varepsilon^2/4} \end{aligned} \quad (2.38)$$

gegeben ist. In Polardarstellung ist also $c_1 = |c_1|e^{i\phi_1}$ mit

$$\begin{aligned} |c_1| &= \frac{g\sqrt{2\pi}}{2|\gamma^2 - \frac{\varepsilon^2}{4}|} \sqrt{\gamma^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} + \gamma\varepsilon \sin(\theta - 2\psi)} \\ \phi_1 &= -\arctan \left\{ \frac{\gamma \cos \psi + \varepsilon/2 \sin(\theta - \psi)}{\gamma \sin \psi - \varepsilon/2 \cos(\theta - \psi)} \right\}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Damit erhält man die Näherungslösung in Ordnung der ersten Harmonischen sofort durch Fourierrücktransformation

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega (c_1\delta(\omega - 1) + c_{-1}\delta(\omega + 1)) \exp\{i\omega t\} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}} |c_1| \cos(t + \phi_1) \\ &= \frac{g}{|\gamma^2 - \frac{\varepsilon^2}{4}|} \sqrt{\gamma^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} + \gamma\varepsilon \sin(\theta - 2\psi)} \cos(t + \phi_1). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Anhand dieser Struktur der Lösung $x_1(t)$ lassen sich die in den Abb. 2.3 gezeigten Verläufe verstehen. Zum einen existiert durch die Nullstelle im Nenner eine Instabilität bei $\varepsilon = \varepsilon_c^{(1)} = 2\gamma$. Solange man mit ε unterhalb dieser Schwelle bleibt, kann man sehr hohe Amplituden der Größenordnung $(\varepsilon_c - \varepsilon)^{-1}$ erwarten. Man erkennt allerdings auch, dass für die spezielle Wahl von $\psi = \theta/2 + 1/4\pi$ und $\psi = \theta/2 + 5/4\pi$ diese drohende Divergenz aufgrund der entsprechenden Nullstelle der Wurzel verschwindet. Dies ist der Squeezing Effekt, der in [71] experimentell verifiziert wurde. Dort wird die Rechnung mit anderen Einstiegsparametern und eines unterschiedlich modelliertem parametrischen Antrieb durchgeführt. Unsere Lösung $x_1(t)$ kann man allerdings auf die dortige abbilden, indem man

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}} (c'_1 \cos t - c''_1 \sin t) \\ &= \frac{g}{\gamma^2 - \frac{\varepsilon^2}{4}} \left[\left(\gamma \sin \psi - \frac{\varepsilon}{2} \cos(\theta - \psi) \right) \cos t + \left(\gamma \cos \psi + \frac{\varepsilon}{2} \sin(\theta - \psi) \right) \sin t \right] \end{aligned}$$

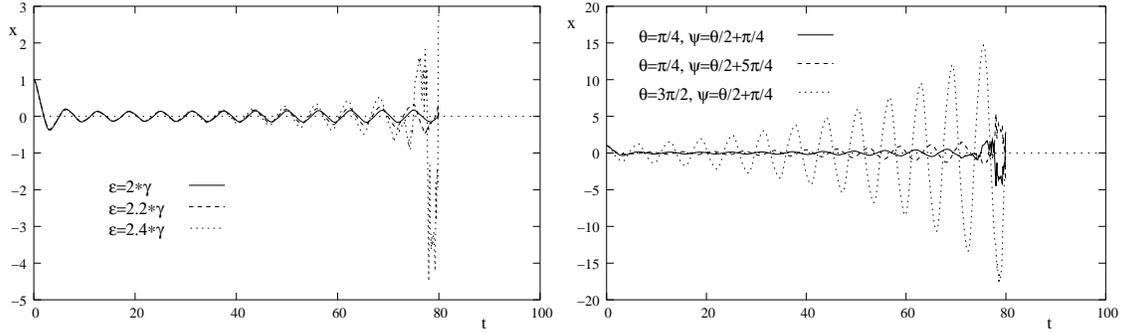


Abbildung 2.4: Phänomen “squeezing” mit Parameterwerten $g = 0.1$, $\gamma = 0.4$. Links: Squeezing wie erwartet für $\psi = \theta/2 + \pi/4$, mit $\theta = \pi/4$, bricht allerdings zusammen für $\varepsilon > \varepsilon_c$. Rechts: Optimales “squeezing” bei über-kritischem $\varepsilon = 2.2\gamma$, ergibt sich für $\psi = \theta/2 + \pi/4$ bei $\theta = \pi/4$ (wie bei $g = 0$). verschlechtert sich allerdings für unterschiedliche Werte von θ bis $\theta = 3/2\pi$, wo auch bei $g = 0$ bestmögliche Verstärkung der Amplitude vorhanden war.

schreibt und $x_{RG}(t, \phi) \equiv x_1(t - \pi/4, \psi = \phi + \pi/4, \theta = 0)$ setzt. Dann ist

$$x_{RG}(t, \phi) = \frac{g}{\gamma} \left[\frac{\sin \phi}{1 - \frac{\varepsilon}{2\gamma}} \cos t + \frac{\cos \phi}{1 + \frac{\varepsilon}{2\gamma}} \sin t \right], \quad (2.41)$$

beziehungsweise unter Rückkehr zu dimensionsbehafteten Größen und mit dem Qualitätsfaktor $Q = \omega_0/\gamma$

$$x_{RG}(t, \phi) = \frac{K}{k_0} Q \left[\frac{\sin \phi}{1 - \frac{Q\Delta k}{2k_0}} \cos(\omega_0 t) + \frac{\cos \phi}{1 + \frac{Q\Delta k}{2k_0}} \sin(\omega_0 t) \right] \quad (2.42)$$

mit den “Federkonstanten” $k_0 = m\omega_0^2$ und $\Delta k = \varepsilon k_0$, was nun in Form und Bezeichnungen exakt mit Gleichung (14) ff. in [71] übereinstimmt. Betrachtet man den parametrischen Antrieb als Verstärker, so ergibt sich ein phasenabhängiger Verstärkungsfaktor von

$$G_V = \frac{|\bar{x}_1(\varepsilon \rightarrow \varepsilon_c)|}{|\bar{x}_1(\varepsilon = 0)|}, \quad (2.43)$$

für den im Experiment ein Faktor 20 realisiert wurde. Dies ist einerseits als Anwendung für Detektoren kleiner Kräfte interessant, da die minimal zu detektierende Kraft mit $G_V^{-1/2}$ skaliert. Andererseits wurde mit diesem Experiment zum ersten Mal thermomechanisches Rauschen durch den Squeezing Effekt unterdrückt. Bevor wir uns der quantenmechanischen Situation zuwenden soll geklärt werden, ob die Resonanz nicht ein Artefakt der Näherung 1. Ordnung ist und in höherer Ordnung Einschränkungen unterliegt.

Nächsthöhere Ordnung

Wir berechnen als Erweiterung zu der Darstellung in [71] die nächsthöhere Ordnung der Entwicklung, lassen also $c_3, c_{-3} \neq 0$ zu. Auflösen von Gl. (2.36) für $\nu = 3$ ergibt

$$c_3 = \eta e^{i\chi} e^{i\theta} c_1 \quad (2.44)$$

mit den zwei Parametern

$$\eta = \frac{\varepsilon}{2} \frac{1}{\sqrt{64 + 9\gamma^2}} \quad \text{und} \quad \chi = \arctan\left(\frac{3\gamma}{8}\right). \quad (2.45)$$

Dies eingesetzt in die Gleichung für $\nu = 1$ ergibt

$$i\gamma c_1 + \frac{\varepsilon}{2} (e^{i\theta} c_1^* + \eta e^{i\chi} c_1) = \frac{g}{2} \sqrt{2\pi} e^{i\psi}. \quad (2.46)$$

Nach Trennen von Real- und Imaginärteil von c_1 ergeben sich folgende Lösungen:

$$\begin{aligned} c_1' &= g \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\gamma \sin \psi - \varepsilon/2 (\cos(\theta - \psi) - \eta \cos(\chi - \psi))}{\gamma^2 - \varepsilon^2/4(1 - \eta^2) + \gamma\varepsilon\eta \sin \chi}, \\ c_1'' &= -g \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\gamma \cos \psi + \varepsilon/2 (\sin(\theta - \psi) + \eta \sin(\chi - \psi))}{\gamma^2 - \varepsilon^2/4(1 - \eta^2) + \gamma\varepsilon\eta \sin \chi}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Drückt man ϕ_1 und ϕ_3 wieder durch Betrag und Phase aus, lässt sich die Lösung in

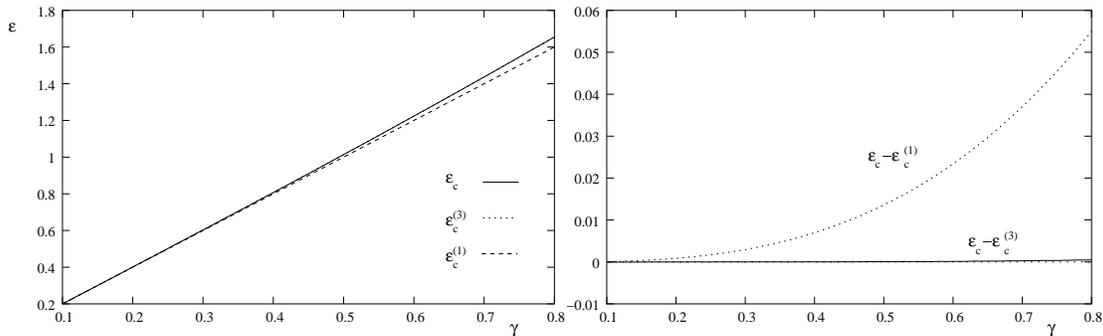


Abbildung 2.5: Stabilitätskriterium für parametrische Lösungen. Links: Absolutwerte für ε_c , $\varepsilon_c^{(1)}$ und $\varepsilon_c^{(3)}$ als Funktion von γ . Rechts: Differenzen $\varepsilon_c - \varepsilon_c^{(1)}$ und $\varepsilon_c - \varepsilon_c^{(3)}$ als Funktion von γ .

nächster Ordnung nach Fourierreücktransformation durch

$$x^{(3)}(t) = \frac{g \cdot \sqrt{Z}}{N} (\cos(t + \phi_1) + \eta \cos(3t + \phi_3)) \quad (2.48)$$

ausdrücken, wobei die auftretenden Terme und Winkel durch

$$\begin{aligned} Z &= \gamma^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} [1 + \eta^2 - 2\eta \cos(\theta + \chi - 2\psi)] + \gamma\varepsilon [\sin(\theta - 2\psi) + \eta \sin(\chi - 2\psi)], \\ N &= |\gamma^2 - \varepsilon^2/4(1 - \eta^2) + \gamma\varepsilon\eta \sin \chi|, \\ \phi_1 &= -\arctan\left(\frac{\gamma \cos \psi + \varepsilon/2 [\sin(\theta - \psi) + \eta \sin(\chi - \psi)]}{\gamma \sin \psi - \varepsilon/2 [\cos(\theta - \psi) - \eta \cos(\chi - \psi)]}\right), \\ \phi_3 &= \phi_1 + \theta + \chi \end{aligned} \quad (2.49)$$

definiert sind. Die Bedingung für das neue, kritische $\varepsilon_c^{(3)}$ erhält man durch Betrachtung der Nullstelle von N . Durch Umschreiben erhält man

$$N = \left| \left[1 + (\gamma^2 - \delta^2 - \varepsilon^2/4)/(64 + \gamma^2) \right] \left[(\gamma^2 + \delta^2 - \varepsilon^2/4) \right] \right| \quad (2.50)$$

mit $\delta^2 = 7\gamma^4/(64 + \gamma^2)$. Daraus lässt sich $\varepsilon_c^{(3)}$ direkt ablesen und man erhält schließlich eine Korrektur zur ersten Ordnung von

$$\varepsilon_c^{(3)} = 2\gamma\sqrt{1 + \delta^2/\gamma^2} \simeq \varepsilon_c^{(1)} \left(1 + \frac{7\gamma^2}{2(64 + \gamma^2)} \right). \quad (2.51)$$

Die Mitnahme von Termen höherer Harmonischer ergibt also keinen Sättigungseffekt, der die Resonanz abschwächt, sondern lediglich eine genauere Bestimmung des analytischen Stabilitätskriteriums. Damit ist erklärt, warum in den Abbildungen 2.2 und 2.3 die Amplitudenverläufe bei $\varepsilon = 2\gamma = \varepsilon_c^{(1)}$ noch stabil blieben. Außerdem erkennt man im Vergleich mit dem Stabilitätskriterium Gl. (2.22), dass $\varepsilon_c^{(3)}$ das exakte ε_c bereits sehr gut approximiert, was in Abb. 2.5 zu sehen ist.

2.2 Quantenmechanischer parametrischer Oszillator

Quantenmechanisch betrachtet hat man es mit einem System zu tun, das ohne Kopplungen an eine dissipative Umgebung durch den zeitabhängigen Hamiltonoperator

$$\hat{H}_0(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x, t) \quad (2.52)$$

bestimmt ist, wobei die Zeitabhängigkeit im Potential

$$\hat{V}(x, t) = \frac{1}{2}m\omega_P^2(t)\hat{x}^2 - K_{\text{ext}}(t)\hat{x} \quad (2.53)$$

über den parametrischen Antrieb Gl. (2.2) sowie über die Kopplung an eine äußere Kraft Gl. (2.3) gegeben ist. Unser Ziel ist es, das mittlere Auslenkungsquadrat $\sigma_{xx} = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ zu bestimmen, und zwar unter Mit-Einbeziehung von Dissipation. Zur Mittelwertbildung muss also der Dichteoperator des Systems zu späteren Zeiten berechnet werden. Eine andere Betrachtungsmöglichkeit, die quantale Dynamik mittels einer Markovschen Methode zu bestimmen, findet sich in [45]. Zuvor soll aber noch unter vereinfachenden Annahmen wie Vernachlässigung von Dämpfung und der äußeren Kraft gezeigt werden, wie sich der parametrische Antrieb in einer quantenmechanischen Formulierung behandeln lässt.

2.2.1 Parametrischer Oszillator ohne Dämpfung

Eine Möglichkeit bestünde darin, die zeitabhängige Schrödingergleichung des Problems Gl. (2.52) zu lösen [90]; die Wirkung der parametrischen Resonanz lässt sich allerdings am instruktivsten in einer Beschreibung im Heisenbergbild sehen, wo sie auch in der Quantenoptik im Zusammenhang mit Ionen in der Paul-Falle vorkommt [74]. Die Idee ist, den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t)$, der formal aus der Lösung der Schrödingergleichung durch

$$\hat{U}(t) = \hat{\mathcal{T}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right] \quad (2.54)$$

definiert ist ($\hat{\mathcal{T}}$ ist der Zeitordnungsoperator), zu bestimmen, über den dann die Operatoren ($\hat{O} = \{\hat{x}, \hat{p}, \hat{a}, \dots\}$) im Heisenbergbild zeitabhängig werden:

$$\hat{O}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{O} \hat{U}(t). \quad (2.55)$$

Damit kann man nun über die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen eine Verbindung zum klassischen Problem erhalten, da $\hat{x}(t)$ der klassischen Bewegungsgleichung (2.14) genügt (mit $\gamma = 0$, und $\theta \equiv 0$). Wenn $\nu(t)$ eine komplexwertige Lösung von Gl. (2.14) mit Anfangsbedingungen $\nu(0) = 1$ und $\dot{\nu}(0) = i\omega_0$ ist, so gilt

$$\hat{x}(t) = \frac{l_0}{\sqrt{2}} [\nu^*(t)\hat{a} + \nu(t)\hat{a}^\dagger] \quad (2.56)$$

wobei \hat{a}^\dagger, \hat{a} die Standard-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des entsprechenden gewöhnlichen Oszillators sind. Betrachtet man die entsprechende Gleichung für den Vernichtungsoperator \hat{a} , so stellt man fest, dass in dessen Zeitentwicklung die Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger mischen. Dies ist aber genau das, was der Squeezing-Operator

$$\hat{S}(r) \equiv \exp \left[\frac{r}{2} (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2) \right] \quad (2.57)$$

bewirkt, denn es ist

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{a} \hat{S}(r) = \cosh(r) \hat{a} - \sinh(r) \hat{a}^\dagger. \quad (2.58)$$

Berücksichtigt man noch die Phasenfaktoren

$$\hat{a} \exp(-i\theta) = \hat{R}^\dagger(\theta) \hat{a} \hat{R}(\theta), \quad (2.59)$$

die durch den Rotationsoperator

$$\hat{R}(\theta) \equiv \exp \left[-i\theta \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (2.60)$$

hervorgerufen werden, so lässt sich insgesamt feststellen, dass der Zeitentwicklungsoperator durch eine Kombination Rotation-Squeezing-Rotation ausgedrückt werden kann:

$$\hat{U}(t) = \hat{R}(\Theta(t)) \hat{S}(r(t)) \hat{R}(\theta(t)), \quad (2.61)$$

wobei die Winkel $\Theta(t)$, $\theta(t)$ und der Squeezing Parameter $r(t)$ Funktionen der $\nu(t)$, $\nu^*(t)$ sind [74], die für uns aber im Detail nicht weiter interessant sind.

Darstellung mittels Wignerfunktion

Ein ungedämpftes, klassisches schwingendes System wird in der Quantenmechanik am besten durch einen kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$, Eigenzustand des Vernichters \hat{a} , dargestellt [27]. Ein solcher Zustand behält in seiner Zeitentwicklung sein Unschärfeprodukt $\Delta x \Delta p$ bei. Startet man zu $t = 0$ zum Beispiel mit dem Zustand $|\alpha = 3\rangle$, so kann man die Wirkung des Zeitentwicklungsoperators am besten über die Darstellung seiner Wignerfunktion $W(x, p; t)$ verfolgen, einer der klassischen "Wahrscheinlichkeit im Phasenraum" entsprechenden, gleichberechtigten und simultanen Darstellung von Ort und Impuls eines Zustandes. Sie ist durch

$$W(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \langle \psi(t) | x - \xi/2 \rangle \langle x + \xi/2 | \psi(t) \rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} p \xi \right) \quad (2.62)$$

definiert. Bei $t = 0$ ist sie für $|\psi(0)\rangle = |\alpha = 3\rangle$ durch

$$W(x, p; 0) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left[-(x' - \sqrt{2}\alpha)^2 - p'^2 \right] \quad (2.63)$$

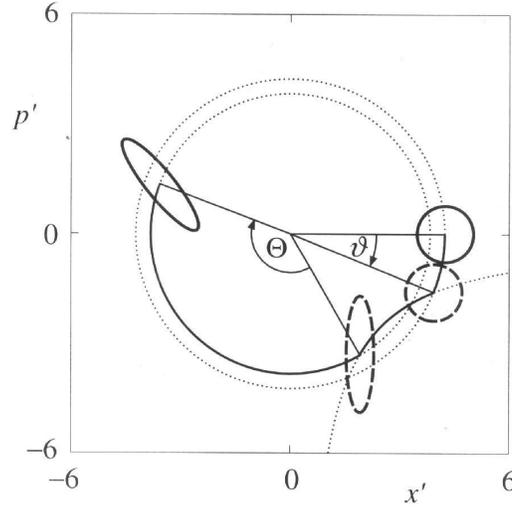


Abbildung 2.6: Zeitentwicklung der Wignerfunktion des kohärenten Zustandes $|\alpha = 3\rangle$ unter parametrischem Antrieb, aus [74]. Der Anfangszustand ($t = 0$) ist durch die durchgezogene Kreislinie repräsentiert. Nach der ersten Rotation (Zwischenbild: gestrichelte Kreislinie) wirkt der Squeezing-Operator (Zwischenbild: gestrichelte Ellipse), der Endzustand zur Zeit t (durchgezogene Ellipse) ergibt sich daraus schließlich nach der zweiten Rotation.

gegeben, wobei $x' = x/l_0$ die dimensionslose Länge und $p' = p \cdot l_0/\hbar$ der entsprechende dimensionslose Impuls ist, was in der x', p' -Ebene durch eine Kreislinie um $(\sqrt{\alpha}, 0)$ repräsentiert wird, siehe Abb. 2.6. Da man die Zeitabhängigkeit in der Wignerfunktion auch in die Ausdrücke für Ort und Impuls abwälzen kann,

$$W(x, p; t) = W(\bar{x}(x, p; t), \bar{p}(x, p; t), 0), \quad (2.64)$$

kann man die zeitentwickelte Wignerfunktion nach Obigem durch eine Sequenz aus Rotation-Squeezing-Rotation darstellen, was in Abb. 2.6 ausgeführt ist. Dabei nimmt die Squeezing-Operation in dieser gemischten Phasenraum-Darstellung die Form

$$\begin{pmatrix} x_{\text{Sq}} \\ p_{\text{Sq}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(-r) & 0 \\ 0 & \exp(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} \quad (2.65)$$

an. Man erkennt also das Prinzip der Amplitudenverstärkung beziehungsweise umgekehrt des Squeezings wieder.

2.2.2 Pfadintegraldarstellung der Dichtematrix

Jetzt soll der Einfluss von Dämpfung mitberücksichtigt werden und so die Zeitentwicklung der Dichtematrix des parametrisch und äußerlich getriebenen Oszillators bereitgestellt werden.

Dissipation durch Kopplung an Reservoir

Wir nehmen an, dass Dissipation durch die Kopplung des Systems an ein Wärmebad stattfindet. Diese sei nach dem Caldeira-Leggett-Modell [12] durch eine Summe aus Oszillatoren mit Massen m_j , Frequenzen ω_j , Impulsen p_j und Koordinaten ξ_j beschrieben:

$$\hat{H}_B = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} \sum_j m_j \omega_j^2 \hat{\xi}_j^2, \quad (2.66)$$

die mit Kopplungsstärke c_j über eine Auslenkungs-Auslenkungs-Wechselwirkung an den parametrischen Oszillator ankoppeln,

$$\hat{H}_I = -\hat{x} \sum_j c_j \hat{\xi}_j + \hat{x}^2 \sum_j \frac{c_j^2}{2m_j \omega_j^2}, \quad (2.67)$$

wobei der zweite Term in H_I , der sogenannte Counterterm, die von der Kopplung hervorgerufene Frequenzverschiebung kompensiert und die Kopplung translationsinvariant macht [40]. Damit lautet der volle Hamiltonian inklusive Wärmebad und Kopplung

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{H}_I + \hat{H}_B \quad (2.68)$$

mit dem durch die Gln. (2.52, 2.53) gegebenen \hat{H}_0 . Von hier ab werden in der Schreibweise die ‘‘Operatorhütchen’’ nicht mehr mitgenommen. Zusätzlich gehen wir davon aus, dass zur Zeit $t_0 = 0$ (an der die Ortskoordinaten mit x_i bezeichnet seien) die Dichtematrix $\rho(x_i, y_i, 0) = \langle x_i | \rho | y_i \rangle$ des Gesamtsystems ‘‘Oszillator und Bad’’ faktorisiert,

$$\begin{aligned} \rho(x_i, y_i, 0) &= \rho_R(x_i, y_i, 0) \times \rho_B(0) \\ &= \rho_{\text{osc}}(x_i, y_i) \times \frac{1}{Z_B} \exp(-\beta H_B), \end{aligned} \quad (2.69)$$

System und Bad also vollständig entkoppelt sind, und das Bad durch seine kanonische Zustandssumme beschrieben wird. Was das Bad betrifft, so müssen nicht alle mikroskopischen Parameter c_j, m_j, ω_j bekannt sein. Da im weiteren Verlauf die Freiheitsgrade des Bades ausintegriert werden, zeigt sich dessen Einfluss nur noch durch die spektrale Dichte, die durch

$$J(\omega) = \pi \sum_j \frac{c_j^2}{2m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \quad (2.70)$$

gegeben ist. Eine genaue Charakterisierung der unterschiedlichen Fälle, die man für das Verhalten von $J(\omega)$ erhalten kann, findet sich in [53]. Wir werden uns letztendlich auf Ohmsche Dämpfung beschränken, und in diesem Fall gilt

$$J(\omega) = m\gamma\omega, \quad (2.71)$$

denn damit wird die Dämpfungskraft der Geschwindigkeit proportional, wie in Gl. (2.4) angenommen.

Pfadintegralmethode

Zur Eliminierung der Badfreiheitsgrade wird die Pfadintegralmethode von Feynman und Vernon benutzt [24]. Die grundsätzliche Idee besteht darin, dass die Wellenfunktion des Gesamtsystems zur Zeit t über einen Propagator K gemäß

$$\psi(x_f, \xi_{j,f}, t) = \int dx_i d\xi_{j,i} K(x_f, \xi_{j,f}, t; x_i, \xi_{j,i}, 0) \psi(x_i, \xi_{j,i}, 0) \quad (2.72)$$

berechnet wird. Fasst man mit $X = \{x, \xi_j\}$ die Koordinaten-Tupel zu einem Ausdruck zusammen, ergibt sich daraus für die Dichtematrix $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ein Ausdruck der Form

$$\rho(X_f, X'_f, t) = \int \int dX_i dX'_i K(X_f, t; X_i, 0) \rho(X_i, X'_i, 0) K^*(X'_f, t; X'_i, 0). \quad (2.73)$$

Der Propagator der Wellenfunktion K lautet nun in Feynmanscher Pfadintegraldarstellung

$$K(X_f, t; X_i, 0) \equiv \langle X_f | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H t \right\} | X_i \rangle = \int \mathcal{D}X \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} S[X] \right\}, \quad (2.74)$$

wobei $S[X]$ das Zeitintegral über die dem Hamiltonoperator Gl. (2.68) entsprechende klassische Lagrangefunktion ist und über alle Pfade $X_i \rightarrow X_f$ integriert wird. Der von der kanonische Zustandssumme herrührende Term $\exp \{-\beta H_B\}$ in $\rho(X_i, X'_i, 0)$ kann mittels der Imaginärzeit $\tau = -i\hbar\beta$ ebenfalls als Pfadintegral, aber mit einer euklidischen Wirkung ausgedrückt werden. Demnach ist die reduzierte Dichtematrix des Systems über eine Ausintegration der Badfreiheitsgrade

$$\rho_R(x_f, x'_f, t) = \text{Sp}_B(\rho) = \int d\xi_{j,f} \rho(x_f, \xi_{j,f}, x'_f, \xi_{j,f}, t) \quad (2.75)$$

bestimmt. Diese lässt sich exakt ausführen, da die Badfreiheitsgrade in diesem Modell quadratische Freiheitsgrade sind, und es ergibt sich (mit $y = x'$)

$$\rho_R(x_f, y_f, t) = \int dx_i \int dy_i J(x_f, y_f, t | x_i, y_i, 0) \rho_{\text{osc}}(x_i, y_i); \quad (2.76)$$

dabei ist der resultierende Evolutionsoperator durch ein zweifaches Pfadintegral

$$J(x_f, y_f, t) = \int \mathcal{D}x \int \mathcal{D}y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S[x] - S[y]) \right\} \exp \{-\Phi[x, y]\} \quad (2.77)$$

gegeben, wobei über alle Pfade $x(s), y(s), 0 \leq s \leq t$ gemäß

$$\begin{aligned} x_i = x(0) &\longrightarrow x(t) = x_f, \\ y_i = y(0) &\longrightarrow y(t) = y_f \end{aligned}$$

integriert wird. Die klassische Wirkung lautet

$$S[x] = \int ds \mathcal{L}(x, \dot{x}, s) = \int_0^t ds \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2(s) - V(x, s) \right], \quad (2.78)$$

während der gesamte Einfluss des Bades im Influenz-Funktional $\exp\{-\Phi\}$ enthalten ist,

$$\begin{aligned} \Phi[x, y] = & \frac{i}{2\hbar} \left\{ [x_i + y_i] \int_0^t ds \gamma(s) [x(s) - y(s)] + \int_0^t ds \int_0^t du \gamma(s-u) [\dot{x}(u) + \dot{y}(u)] [x(s) - y(s)] \right\} \\ & + \frac{1}{2\hbar} \int_0^t ds \int_0^t du [x(u) - y(u)] K(u-s) [x(s) - y(s)], \end{aligned} \quad (2.79)$$

wobei die Korrelationsfunktion der Rauschkraft $K(s)$ und die frequenzabhängige Reibungskonstante $\gamma(s)$ folgendermaßen durch die spektrale Dichte $J(\omega)$ aus Gl. (2.70) bestimmt sind:

$$\begin{aligned} K(s) &= \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \coth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right) \cos(\omega s) J(\omega) \\ &= m\gamma \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \coth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right) \cos(\omega s) && \text{(Ohmsch)} \\ \gamma(s) &= \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega s) \\ &= 2\gamma\delta(s) && \text{(Ohmsch)} \end{aligned} \quad (2.80)$$

2.2.3 Berechnung des Evolutionsoperators

Da die auftretenden Pfadintegrale quadratisch in x, y sind, können sie exakt integriert werden [40]. Bis auf einen Normierungsfaktor ergibt sich das Resultat als der Integrand, ausgewertet am klassischen, die Wirkung minimierenden Pfad.

$$J(x_f, y_f, t) = \frac{1}{N(t)} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(S[x_{\text{cl}}] - S[y_{\text{cl}}])\right\} \exp\{-\Phi[x_{\text{cl}}, y_{\text{cl}}]\}. \quad (2.81)$$

Die Bewegungsgleichungen für $x_{\text{cl}}(t), y_{\text{cl}}(t)$ ergeben sich aus den entsprechenden Funktionalvariationen des Exponenten in (2.77). Angesichts der Form von S, Φ ist es aber günstiger, zu Summen und Differenz-Variablen überzugehen

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2}(x + y) \\ q &= x - y, \end{aligned} \quad (2.82)$$

welche den Diagonal- und Außerdiagonalelementen der Dichtematrix entsprechen. In diesen Variablen lautet der Propagator (2.77) dann unter Verwendung von $g(s) = K_{\text{ext}}(s)/m$:

$$\begin{aligned}
 J(Q_f, q_f, t) = & \int \mathcal{D}Q \int \mathcal{D}q \times \\
 & \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} m \int_0^t ds [\dot{Q}(s)\dot{q}(s) - \omega_P^2(s)Q(s)q(s) + g(s)q(s)] \right\} \times \\
 & \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} m [Q_i \int_0^t ds \gamma(s)q(s) + \int_0^t ds \int_0^s du \gamma(s-u)\dot{Q}(u)q(s)] \right\} \times \\
 & \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^t ds \int_0^s du [q(u)K(u-s)q(s)] \right\}, \quad (2.83)
 \end{aligned}$$

wobei über alle Pfade $Q(s)$, $q(s)$, $0 \leq s \leq t$ gemäß

$$\begin{aligned}
 Q_i = Q(0) & \longrightarrow Q(t) = Q_f \\
 q_i = q(0) & \longrightarrow q(t) = q_f
 \end{aligned} \quad (2.84)$$

integriert wird. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus der Variation der Wirkung nach den Variablen Q und q . Variationsableitung nach Q liefert zunächst

$$-\frac{i}{\hbar} m \int_0^t ds \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} q + \omega_P^2(s)q \right) \delta Q(s) + q(s) \int_0^s du \gamma(s-u) \delta \dot{Q}(u) \right] = 0, \quad (2.85)$$

wobei der einzig vorkommende nicht-triviale Term

$$I \equiv -\frac{i}{\hbar} m \int_0^t ds q(s) \int_0^s du \gamma(s-u) \delta \dot{Q}(u)$$

unter Verwendung der Identität

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_0^x dy h(x-y)f(y) = \int_0^x dy \left[f(y) \frac{\partial}{\partial x} h(x-y) \right] + h(0)f(x)$$

folgendermaßen berechnet wird:

$$\begin{aligned}
 \int_0^s du \gamma(s-u) \delta \dot{Q}(u) &= [\gamma(s-u) \delta Q]_0^s - \int_0^s du \left(\frac{\partial}{\partial u} \gamma(s-u) \right) \delta Q(u) \\
 &= \gamma(0) \delta Q(s) - \int_0^s du \left((-1) \frac{\partial}{\partial s} \gamma(s-u) \right) \delta Q(u) \\
 &= \frac{\partial}{\partial s} \int_0^s dy \gamma(s-u) \delta Q(u).
 \end{aligned}$$

Damit ergibt sich in Gl. (2.86) für I , wobei wir hier im zweiten Schritt vom Ohmschen Fall ausgehen,

$$\begin{aligned} I &= -\frac{i}{\hbar}m \int_0^t ds q(s) \frac{\partial}{\partial s} \int_0^s du \gamma(s-u) \delta Q(u) \\ &= -\frac{i}{\hbar}m \left(\left[q(s) \int_0^s du \gamma(s-u) \delta Q(u) \right]_0^t - \int_0^t ds \dot{q}(s) \frac{\partial}{\partial s} \int_0^s du 2\gamma\delta(s-u) \delta Q(u) \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}m \left(\int_0^t ds [2q_f \gamma \delta(s-u) - \gamma \dot{q}(s)] \delta Q(s) \right), \end{aligned}$$

woraus sich schließlich die Bewegungsgleichung für q ergibt

$$\frac{\partial^2}{\partial s^2} q - \gamma \frac{\partial}{\partial s} q + \omega_P^2(s) q = -2q_f \gamma \delta(t-s). \quad (2.86)$$

Die Außerdiagonalelemente genügen also der klassischen Bewegungsgleichung, aber mit negativer Dämpfung. Die Inhomogenität auf der rechten Seite von Gl. (2.86) ist nur zur Zeit $s = t$ von Null verschieden, man kann sich also auf die Lösung der homogenen Gleichung beschränken. Die Variationsableitung nach q liefert

$$-\frac{i}{\hbar}m \int_0^t ds \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} Q + \omega_P^2(s) Q - g(s) + \gamma(s) Q_i + \int_0^s du \gamma(s-u) \dot{Q}(u) \right] \delta q(s) = 0,$$

woraus sich sofort die Bewegungsgleichung für Q ergibt

$$\frac{\partial^2}{\partial s^2} Q + \gamma \frac{\partial}{\partial s} Q + \omega_P^2(s) Q = -2Q_i \gamma \delta(s) + g(s), \quad (2.87)$$

die wiederum für den Ohmschen Fall ausgedrückt ist. Für das Diagonalelement erhält man also wieder das positive Vorzeichen beim Dämpfungsterm. Zur Lösung dieser Differentialgleichung kann man auf die bekannten Lösungen des klassischen parametrischen Oszillators zurückgreifen.

In der weiteren Behandlung des Problems erweitern wir die in [90] gegebene Darstellung, indem auch Terme, die von der äußeren Kraft herrühren, mitberücksichtigt werden. Dazu werden ausgehend von den Funktionen f_i aus Gl. (2.24), folgende Funktionen eingeführt:

$$\begin{aligned} \bar{f}_1(t, s) &= f_1(s)/f_1(t), & \bar{f}_2(t, s) &= f_2(s) - \bar{f}_1(t, s)f_2(t), \\ \tilde{f}_1(t, s) &= \bar{f}_1(t, s) \exp\{\gamma(s-t)\}, & \tilde{f}_2(t, s) &= \bar{f}_2(t, s) \exp\{\gamma s\}, \\ G(s) &= f_2(s) \int ds' \frac{f_1(s')g(s')}{W(s')} - f_1(s) \int ds' \frac{f_2(s')g(s')}{W(s')}, & \bar{G}(t, s) &= G(s) - \bar{f}_1(t, s)G(t), \end{aligned} \quad (2.88)$$

wobei W die Wronski-Determinante aus Gl. (2.26) ist. Randwerte dieser Funktionen sind

$$\begin{aligned} \bar{f}_1(t, 0) &= 0, & \bar{f}_1(t, t) &= 1, & \bar{f}_2(t, 0) &= 1, & \bar{f}_2(t, t) &= 0, \\ \tilde{f}_1(t, 0) &= 0, & \tilde{f}_1(t, t) &= 1, & \tilde{f}_2(t, 0) &= 1, & \tilde{f}_2(t, t) &= 0, \\ G(0) &= 0, & & & \bar{G}(t, 0) &= 0, & \bar{G}(t, t) &= 0. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Die Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen (2.86, 2.87) lauten damit:

$$q_{\text{cl}}(s) = \tilde{f}_1 q_f + \tilde{f}_2 q_i \quad (2.90)$$

$$Q_{\text{cl}}(s) = \bar{f}_1 Q_f + (\bar{f}_2 + 2\gamma f_1 [1 - \Theta(s)]) Q_i + \bar{G}. \quad (2.91)$$

Durch partielle Integration und unter Ausnutzung von Gl. (2.87) lässt sich der Evolutionsoperator Gl. (2.83) berechnen:

$$\begin{aligned} J(Q_f, q_f, t) &= \frac{1}{N(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} m [q_{\text{cl}}(s) \dot{Q}_{\text{cl}}(s)]_0^t \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \int_0^t ds \int_0^t du [q_{\text{cl}}(u) K(u-s) q_{\text{cl}}(s)] \right\} \\ &= \frac{1}{N(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} m [(\alpha_1 q_f - \alpha_{1,0} q_i) Q_f + (\alpha_2 q_f - \alpha_{2,0} q_i) Q_i + \Gamma q_f - \Gamma_0 q_i] \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} (\kappa_{11} q_f^2 + 2\kappa_{12} q_f q_i + \kappa_{22} q_i^2) \right\}, \end{aligned} \quad (2.92)$$

wobei die hier eingeführten zeitabhängigen Koeffizienten durch

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{f}_1(t, s)|_t, & \alpha_{1,0} &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{f}_1(t, s)|_0, \\ \alpha_2 &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{f}_2(t, s)|_t, & \alpha_{2,0} &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{f}_2(t, s)|_0 + \gamma, \\ \Gamma &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{G}(t, s)|_t, & \Gamma_0 &= \frac{\partial}{\partial s} \bar{G}(t, s)|_0 \end{aligned} \quad (2.93)$$

sowie

$$\kappa_{ij} = \frac{1}{2} \int_0^t ds \int_0^t du \tilde{f}_i(s) K(s-u) \tilde{f}_j(u) \quad (2.94)$$

gegeben sind. Zwischen diesen Koeffizienten und den Funktionen aus den Gln. (2.24, 2.88) bestehen folgende Zusammenhänge, die in weiteren Rechnungen vereinfachend zu nutzen sind

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha_{1,0}} &= f_1(t), & \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} &= \dot{f}_1(t), \\ \frac{\alpha_{2,0}}{\alpha_{1,0}} &= -(f_2(t) - \gamma/2 f_1(t)), & \alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \alpha_{2,0} &= (\dot{f}_2(t) - \gamma/2 \dot{f}_1(t)), \\ \frac{\Gamma_0}{\alpha_{1,0}} &= -G(t), & \Gamma - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 &= \dot{G}(t). \end{aligned} \quad (2.95)$$

Normierungsfaktor

Der Normierungsfaktor $N(t)$ ergibt sich folgendermaßen: In den neuen Koordinaten lautet Gl. (2.75) zur Bestimmung der reduzierten Dichtematrix zur Zeit t

$$\rho_R(Q_f, q_f, t) = \int dQ_i \int dq_i J(Q_f, q_f, t | Q_i, q_i, 0) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i, 0), \quad (2.96)$$

wobei $\rho_{osc}(Q_i, q_i, 0)$ die Dichtematrix des ungestörten Systems zur Zeit $t = 0$ bezeichnet, welche natürlich normiert ist,

$$\text{Sp}(\rho_{osc}) = \int dQ_i \rho_{osc}(Q_i, q_i = 0, 0) = 1. \quad (2.97)$$

Spaltet man J auf in einen Term, der Q_f enthält, und den Rest J_1 und verwendet die Identität

$$\int dy y^n \exp\{-iAxy\} = \frac{2\pi}{A} \left(\frac{i}{A} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x), \quad (2.98)$$

so ergibt sich die Normierungsbedingung für die Dichtematrix zur Zeit t

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\rho_R) &= \int dQ_f \rho_R(Q_f, q_f = 0, t) \\ &= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i J_1(q_f = 0, t | Q_i, q_i, 0) \rho_{osc}(Q_i, q_i, 0) \int dQ_f \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} m \alpha_{1,0} q_i Q_f\right\} \\ &= \frac{1}{N} \int dQ_i J_1(q_f = 0, t | Q_i, q_i = 0, 0) \rho_{osc}(Q_i, q_i = 0, 0) \frac{2\pi\hbar}{\alpha_{1,0} m} \\ &= \frac{1}{N} \frac{2\pi\hbar}{\alpha_{1,0} m} \int dQ_i \rho_{osc}(Q_i, q_i = 0, 0) = 1. \end{aligned}$$

Daraus folgt schließlich mit Gl. (2.95) der Normierungsfaktor

$$N(t) = \frac{2\pi\hbar}{m} f_1(t). \quad (2.99)$$

Das Endergebnis für den Evolutionsoperator lautet also in günstiger Schreibweise

$$\begin{aligned} J(Q_f, q_f, t | Q_i, q_i, 0) &= \frac{1}{N(t)} J_1(q_f, t | Q_i, q_i, 0) \times \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} m \alpha_{1,0} q_i Q_f\right\}, \\ J_1(q_f, t | Q_i, q_i, 0) &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar} m [(\alpha_2 q_f - \alpha_{2,0} q_i) Q_i + (\Gamma q_f - \Gamma_0 q_i)]\right\} \times \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} (\kappa_{11} q_f^2 + 2\kappa_{12} q_f q_i + \kappa_{22} q_i^2)\right\}. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Dieses Ergebnis stimmt ohne die Γ, Γ_0 enthaltenden Terme (zusätzliche Berücksichtigung der des externen Antriebs), mit dem in [90] erhaltenen Evolutionsoperator überein.

2.2.4 Korrelationsfunktionen

Mit der Kenntnis der Dichtematrix zur Zeit t lassen sich nun Erwartungswerte und Korrelationsfunktionen zu gleichen Zeiten berechnen. Dazu drücken wir zunächst die uns interessierenden Erwartungswerte $\langle \hat{x} \rangle, \langle \hat{p} \rangle, \langle \hat{x}^2 \rangle, \dots$ durch die entsprechenden Ausdrücke der Summen und Differenz-Variablen Q, q aus.

Darstellung der Erwartungswerte von Ort und Impuls

In den neuen Koordinaten nehmen die Erwartungswerte unter Verwendung von $\rho(x, y) = \langle x | \rho | y \rangle$, $\rho(Q, q) = \langle x(Q, q) | \rho | y(Q, q) \rangle$ und $\int dx dy \longrightarrow \int dQ dq$ folgende Formen an:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \text{Sp}\{\rho_R \hat{x}\} = \iint dx dy \rho(x, y) \langle y | \hat{x} | x \rangle = \iint dx dy \rho(x, y) x \delta(x - y) \\ &\longrightarrow \iint dQ dq \rho(Q, q) (Q + q/2) \delta(q) = \int dQ Q \rho(Q, q = 0), \end{aligned} \quad (2.101)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \text{Sp}\{\rho_R \hat{p}\} = \iint dx dy \rho(x, y) \iint dp dp' \langle y | p' \rangle \langle p' | \hat{p} | p \rangle \langle p | x \rangle \\ &= \iint dx dy \rho(x, y) \iint dp dp' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'y/\hbar} p \delta(p - p') \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \\ &= \iint dx dy \rho(x, y) \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{-ip(x-y)/\hbar} \longrightarrow \iint dQ dq \rho(Q, q) \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{-ipq/\hbar} \\ &= \iint dQ dq \rho(Q, q) i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \delta(q) = \int dQ \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \rho(Q, q) \right]_{q=0}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Analog ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \int dQ Q^2 \rho(Q, q = 0), \\ \langle \hat{p}^2 \rangle &= \int dQ \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} \rho(Q, q) \right]_{q=0}. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Desweiteren ist für die gemischten Produkte

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \hat{p} \rangle &= \text{Sp}\{\rho_R \hat{x} \hat{p}\} = \iiint dx dy dz \rho(x, y) \langle y | \hat{x} | z \rangle \langle z | \hat{p} | x \rangle \\ &= \iint dx dy \rho(x, y) y \iint dp dp' \langle y | p' \rangle \langle p' | \hat{p} | p \rangle \langle p | x \rangle \\ &\longrightarrow \iint dQ dq \rho(Q, q) (Q - q/2) i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \delta(q) \\ &= \int dQ \int dq \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} [\rho(Q, q) (Q - q/2)] \delta(q) = \int dQ \left[Q \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \rho(Q, q) \right]_0 + \frac{i\hbar}{2} \rho(Q, q = 0), \\ \langle \hat{p} \hat{x} \rangle &= \text{Sp}\{\rho_R \hat{p} \hat{x}\} = \iiint dx dy dz \rho(x, y) \langle y | \hat{p} | z \rangle \langle z | \hat{x} | x \rangle \\ &= \iint dx dy \rho(x, y) x \iint dp dp' \langle y | p' \rangle \langle p' | \hat{p} | p \rangle \langle p | x \rangle \\ &\longrightarrow \int dQ \left[Q \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \rho(Q, q) \right]_0 - \frac{i\hbar}{2} \rho(Q, q = 0); \end{aligned} \quad (2.104)$$

also gilt für den Antikommutator

$$\langle \{\hat{x}, \hat{p}\} \rangle = 2 \int dQ Q \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \rho(Q, q) \right]_{q=0} ; \quad (2.105)$$

und die Standard-Kommutatorrelation $\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = i\hbar$ ist zu allen Zeiten erfüllt.

Berechnung der Erwartungswerte und Varianzen

Bezeichnen $\langle x_0 \rangle = \int dQ_i \rho_{\text{osc}}(Q_i, 0)$ und $\langle p_0 \rangle = \int dQ_i (-i\hbar) \rho'_{\text{osc}}(Q_i, 0)$ die Erwartungswerte von Ort und Impuls zur Zeit $t = 0$, zu der das System gekoppelt wird und die Antriebe einsetzen, so ist mit Gl. (2.98) und unter Verwendung von Gl. (2.95) der Orts-Erwartungswert zur Zeit t durch

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int dQ_f Q_f \rho_R(Q_f, q_f = 0, t) \\ &= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i J_1(0, t | Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \int dQ_f Q_f \exp \left\{ -\frac{im\alpha_{1,0}}{\hbar} q_i Q_f \right\} \\ &= \frac{1}{\alpha_{1,0} m} \int dQ_i \int dq_i J_1(q_f = 0, t | Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \delta(q_i) \\ &= \frac{1}{\alpha_{1,0} m} \int dQ_i \rho_{\text{osc}}(Q_i, 0) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} J_1(0, t | Q_i, q_i) |_{q_i=0} + J_1(0, t | Q_i, 0) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) |_{q_i=0} \\ &= -\frac{\alpha_{2,0}}{\alpha_{1,0}} \int dQ_i Q_i \rho_{\text{osc}}(Q_i, 0) + \frac{1}{\alpha_{1,0} m} \int dQ_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) |_{q_i=0} - \frac{1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 \\ &= (f_2(t) - \frac{\gamma}{2} f_1(t)) \langle x_0 \rangle + f_1(t) \frac{\langle p_0 \rangle}{m} + G(t) \end{aligned} \quad (2.106)$$

gegeben. Für den Erwartungswert des Impulses wird zunächst

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} J_1 |_{q_f=0} = (m\alpha_1 Q_f + c(Q_i, q_i)) \times J_1 |_{q_f=0}$$

mit $c(Q_i, q_i) = m(\alpha_2 Q_i + \Gamma) + 2i\kappa_{12}q_i$ berechnet. Damit erhält man

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int dQ_f \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \rho_R(Q_f, q_f, t) |_{q_f=0} \\
 &= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i \int dQ_f \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} J(Q_f, q_f = 0, t) |_{q_f=0} \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \\
 &= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i J_1(0, t | Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \int dQ_f (m\alpha_1 Q_f + c(Q_i, q_i)) \exp \left\{ -\frac{im\alpha_{1,0}}{\hbar} q_i Q_f \right\} \\
 &= \int dQ_i \int dq_i J_1(Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \left(i\hbar \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \delta'(q_i) + c(Q_i, q_i) \delta(q_i) \right) \\
 &= \int dQ_i \left[J_1 \rho_0 c + \frac{\hbar}{i} \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} (J_1' \rho_{\text{osc}} + J_1 \rho_{\text{osc}}') \right]_{q_i=0} \\
 &= m \left(\alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \alpha_{2,0} \right) \langle x_0 \rangle + m \left(\Gamma - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 \right) + \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \langle p_0 \rangle \\
 &= \dot{f}_1(t) \langle p_0 \rangle + m \left(\dot{f}_2(t) - \frac{\gamma}{2} \dot{f}_1(t) \right) \langle x_0 \rangle + m \dot{G}(t) = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle. \tag{2.107}
 \end{aligned}$$

Zunächst fällt sofort auf, dass Gl. (2.106) nicht mit dem klassischen Ergebnis Gl. (2.30) übereinstimmt. Dies liegt daran, dass die Zeitentwicklung von $\langle \hat{p} \rangle$ bei $t = 0$ nicht stetig ist, $\langle p(t \rightarrow 0) \rangle = \langle p_0 \rangle - \gamma/2 \langle x_0 \rangle \neq \langle p_0 \rangle$, was eine Folge der ‘schlagartig’ einsetzenden Kopplung bei $t = 0$ ist und vermieden werden kann, indem man keine faktorisierenden Anfangsbedingungen wie Gl. (2.69) verwendet [33]. Angesichts der Tatsache, dass beim quantenmechanischen Oszillator Ort und Impuls im Mittel verschwinden, wenn er im thermischen Gleichgewicht ist, spielt dies aber nur eine untergeordnete Rolle, und so beschreiben die Gln. (2.106, 2.107) lediglich das von der äußeren Kraft erzwungene und vom parametrischen Antrieb verstärkte Aufschaukeln der Amplituden, wie schon im klassischen Fall beobachtet wurde. Interessanter sind die 2-Punkt Korrelationsfunktionen. Für den Erwartungswert $\langle x^2 \rangle$ berechnet man zunächst vorbereitend die Ableitungen von J_1 nach q_i , im Folgenden mit ' bezeichnet:

$$\begin{aligned}
 J_1(0, t | Q_i, q_i) &= \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \kappa_{22} q_i^2 - \frac{i}{\hbar} m \alpha_{2,0} q_i Q_i - \frac{i}{\hbar} m \Gamma_0 q_i \right\}, \\
 J_1(0, t | Q_i, 0) &= 1, \\
 J_1(0, t | Q_i, q_i)' &= \left(-\frac{2}{\hbar} \kappa_{22} q_i - \frac{i}{\hbar} m \alpha_{2,0} Q_i - \frac{i}{\hbar} m \Gamma_0 \right) \times J_1, \\
 J_1(0, t | Q_i, 0)' &= -\frac{i}{\hbar} m (\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0), \\
 J_1(0, t | Q_i, q_i)'' &= \left[-\frac{2}{\hbar} \kappa_{22} + \left(-\frac{2}{\hbar} \kappa_{22} q_i - \frac{i}{\hbar} m \alpha_{2,0} Q_i - \frac{i}{\hbar} m \Gamma_0 \right)^2 \right] \times J_1, \\
 J_1(0, t | Q_i, 0)'' &= -\frac{2}{\hbar} \kappa_{22} - \frac{m^2}{\hbar^2} \left((\alpha_{2,0} Q_i)^2 + 2\alpha_{2,0} Q_i \Gamma_0 + (\Gamma_0)^2 \right). \tag{2.108}
 \end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int dQ_f Q_f^2 \rho_R(Q_f, q_f = 0, t) \\
&= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i J_1(0, t | Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \int dQ_f Q_f^2 \exp \left\{ -\frac{im\alpha_{1,0}}{\hbar} q_i Q_f \right\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{(m\alpha_{1,0})^2} \int dQ_i \int dq_i J_1(q_f = 0, t | Q_i, q_i) \rho_{\text{osc}}(Q_i, q_i) \frac{2\pi i \hbar^2}{(\alpha_{1,0} m)^2} \delta(q_i)'' \\
&= -\frac{\hbar^2}{(m\alpha_{1,0})^2} \int dQ_i [J_1'' \rho + 2J_1' \rho' + J_1 \rho'']_0 \\
&= \frac{2\hbar}{(m\alpha_{1,0})^2} \kappa_{22} + \frac{(\alpha_{2,0})^2}{(\alpha_{1,0})^2} \langle x_0^2 \rangle + 2 \frac{\alpha_{2,0}}{(\alpha_{1,0})^2} \Gamma_0 \langle x_0 \rangle + \frac{1}{(\alpha_{1,0})^2} (\Gamma_0)^2 \\
&\quad - \frac{2}{m(\alpha_{1,0})^2} \int dQ_i (\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0) \frac{\hbar}{i} \rho'(Q_i, 0) + \frac{1}{(m\alpha_{1,0})^2} \langle p_0^2 \rangle \\
&= (f_2 - \gamma/2f_1)^2 \langle x_0^2 \rangle + 2(f_2 - \gamma/2f_1)G(t) \langle x_0 \rangle + G(t)^2 \\
&\quad + \frac{1}{m} f_1 (f_2 - \gamma/2f_1) \langle \{x, p\}_0 \rangle + \frac{2}{m} f_1 G(t) \langle p_0 \rangle + f_1^2 \frac{\langle p_0^2 \rangle}{m^2} + \frac{2\hbar}{m^2} f_1^2 \kappa_{22}. \quad (2.109)
\end{aligned}$$

Hier bezeichnen $\langle x_0^2 \rangle = \text{Sp}(\hat{x}^2 \rho_{\text{osc}})$, $\langle p_0^2 \rangle = \text{Sp}(\hat{p}^2 \rho_{\text{osc}})$ und $\langle \{x, p\}_0 \rangle = \text{Sp}(\{\hat{x}, \hat{p}\} \rho_{\text{osc}})$ die Erwartungswerte der Operatoren-Quadrate beziehungsweise des Antikommutators zur Zeit $t = 0$. Desweiteren tritt erstmals ein Term $\sim \kappa_{22}$ auf, der von der Korrelationsfunktion der Rauschkraft Gl. (2.80) herrührt. Die Berechnung von $\langle p^2 \rangle$ und des Antikommutators $\langle \{\hat{x}, \hat{p}\} \rangle$ ist aus Gründen der Übersichtlichkeit in Anhang A zu finden. Die Ergebnisse lauten für $\langle p^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= f_1^2 \langle p_0^2 \rangle + m^2 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right)^2 \langle x_0^2 \rangle + m\dot{f}_1 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right) \langle \{x, p\} \rangle \\
&\quad + 2m\dot{f}_1 \dot{G}(t) \langle p_0 \rangle + 2m^2 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right) \dot{G}(t) \langle x_0 \rangle + m^2 (\dot{G}(t))^2 \\
&\quad + 2\hbar(\kappa_{11} + 2\dot{f}_1 \kappa_{12} + \dot{f}_1^2 \kappa_{22}). \quad (2.110)
\end{aligned}$$

und für den Antikommutator

$$\begin{aligned}
\langle \{\hat{x}, \hat{p}\} \rangle &= m \frac{\partial}{\partial t} (f_2 - \gamma/2f_1)^2 \langle x_0^2 \rangle + m \frac{\partial}{\partial t} [(f_2 - \gamma/2f_1)G(t)] \langle x_0 \rangle \\
&\quad + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial t} [f_1 (f_2 - \gamma/2f_1)]^2 \langle \{x, p\}_0 \rangle + m \frac{\partial}{\partial t} G^2(t) \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial t} [f_1 G(t)] \langle p_0 \rangle + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial t} f_1^2 \langle p_0^2 \rangle + \frac{4\hbar}{m} f_1 (\dot{f}_1 \kappa_{22} + \kappa_{12}) \quad (2.111)
\end{aligned}$$

Bei der Berechnung des mittleren Auslenungsquadrates $\sigma_{xx} = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$ sowie der Varianzen $\sigma_{pp} = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2$ des Impulses und des gemischten Produktes $\sigma_{xp} = \langle \{\hat{x}, \hat{p}\} \rangle / 2 - \langle \hat{x} \rangle \langle \hat{p} \rangle$

ist festzustellen, dass der Einfluss des äußeren Antriebs herausfällt. Dies mag daran liegen, dass beim harmonischen Oszillator die Heisenberg-Operatoren die klassischen Gleichungen erfüllen, und dass im Hamiltonoperator die äußere Kraft nur linear an die Auslenkung gekoppelt ist. Das Wesen des parametrischen Antriebs dagegen bleibt in den Varianzen erhalten:

$$\sigma_{xx} = (f_2 - \gamma/2f_1)^2 \sigma_{xx}^0 + \frac{1}{m^2} f_1^2 \sigma_{pp}^0 + \frac{2}{m} f_1 (f_2 - \gamma/2f_1) \sigma_{xp}^0 + \frac{2\hbar}{m^2} f_1^2 \kappa_{22}, \quad (2.112)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{pp} &= m^2 (\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1)^2 \sigma_{xx}^0 + \dot{f}_1^2 \sigma_{pp}^0 + 2m\dot{f}_1 (\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1) \sigma_{xp}^0 \\ &\quad + 2\hbar (\kappa_{11} + 2\dot{f}_1 \kappa_{12} + \dot{f}_1^2 \kappa_{22}), \end{aligned} \quad (2.113)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xp} &= \frac{m}{2} \frac{\partial}{\partial t} [f_2 - \gamma/2f_1]^2 \sigma_{xx}^0 + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial t} f_1^2 \sigma_{pp}^0 + \frac{\partial}{\partial t} [f_1 (f_2 - \gamma/2f_1)]^2 \sigma_{xp}^0 \\ &\quad + \frac{2\hbar}{m} f_1 (\kappa_{12} + \dot{f}_1 \kappa_{22}). \end{aligned} \quad (2.114)$$

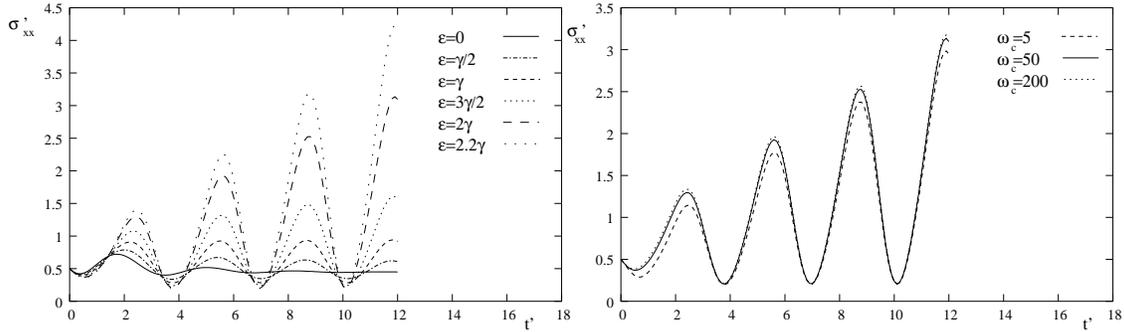


Abbildung 2.7: Links: Zeitlicher Verlauf von σ'_{xx} bei $\gamma = 0.4$, $T = 0$, $\omega_c = 50$. Squeezing und Verstärkung folgen periodisch aufeinander.

Rechts: σ'_{xx} bei $\gamma = 0.4$, $T = 0$ und $\varepsilon = 2\gamma$ für verschiedene Abbruch-Frequenzen ω_c der Spektralfunktion des Bades.

2.2.5 Ergebnisse

In der numerischen Auswertung geben wir die auftretenden Varianzen in ihren natürlichen Einheiten $[\sigma_{xx}] = l_0^2$, $[\sigma_{pp}] = \hbar^2 l_0^2$ und $[\sigma_{xp}] = \hbar$, an und bezeichnen die dimensionslosen Varianzen mit gestrichelten Größen σ'_{xx} , σ'_{pp} und σ'_{xp} . Außerdem wird die Zeit dimensionslos dargestellt (t'), die dimensionsbehaftete Zeiteinheit ist ω_0^{-1} . Desweiteren nehmen wir als Startwerte die des ungekoppelten harmonischen Oszillators bei Temperatur Null, $\sigma_{xx}^0 = \sigma_{pp}^0 = 1/2$ und $\sigma_{xp}^0 = 0$. Betrachten wir zunächst in Abb. 2.7 die mittleren Auslenungsquadrate σ'_{xx} als Funktion von ε bei festem $\gamma = 0.4$, $T = 0$ und Phasenverschiebung des Antriebs $\theta = 0$. Da der äußere Antrieb keinen Beitrag liefert, strebt das

System bei ebenfalls ausgeschaltetem parametrischen Antrieb $\varepsilon = 0$ ins Gleichgewicht zu $\sigma'_{xx}(\varepsilon = 0) \simeq 0.45$. Bei eingeschaltetem parametrischen Antrieb schwankt σ'_{xx} "sin"-artig zwischen einem Minimalwert, der unterhalb von $\sigma'_{xx}(\varepsilon = 0)$ liegt, und einem Maximalwert der um einen Faktor

$$c_V \simeq [1 - \varepsilon/\varepsilon_c]^{-1} \quad (2.115)$$

größer ist. Ist $c_V \gg 1$, so wird der Maximalwert nicht sofort erreicht, sondern σ'_{xx} schaukelt sich in einem linearen Verhalten zu diesem Wert hoch. Man erhält also insgesamt eine zeitlich periodische Abfolge von Squeezing mit $\sigma'_{xx} < \sigma'_{xx}(\varepsilon = 0)$ und Verstärkung von Fluktuationen $\sigma'_{xx} \gg \sigma'_{xx}(\varepsilon = 0)$. Wird allerdings $\varepsilon > \varepsilon_c$, so steigen die erreichten Maximalwerte exponentiell an, das System kommt nicht ins Gleichgewicht, sondern wird instabil. Für die numerische Auswertung wurde die Spektralfunktion des Bades Gl. (2.71) bei $\omega_c = 50 \omega_0$ abrupt abgeschnitten. Dies ist in Ordnung, da höhere Werte von ω_c die Ergebnisse nicht mehr signifikant verändern (siehe Abb. 2.7), und wir nur an Zeitskalen $t > \omega_0^{-1} \gg \omega_c^{-1}$ interessiert sind. Was die Temperaturen betrifft, so ist $T = 0$ eine gute

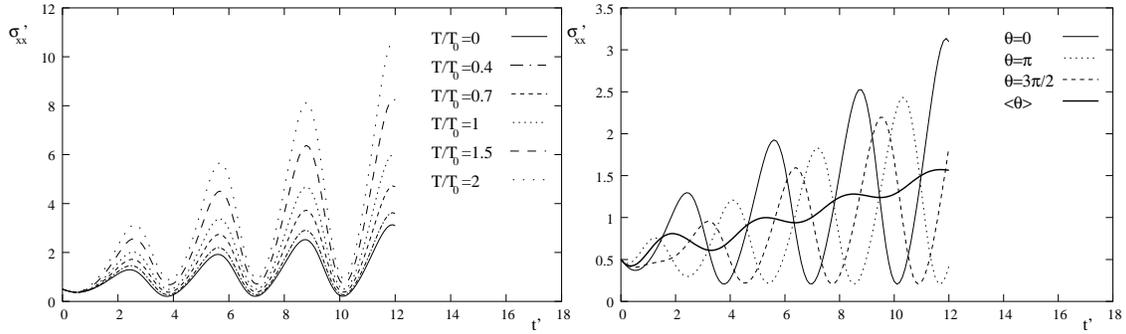


Abbildung 2.8: Links: Zeitlicher Verlauf von σ'_{xx} bei $\gamma = 0.4$, $\varepsilon = 2\gamma$ für verschiedene Temperaturen des Bades T/T_0 .

Rechts: σ'_{xx} bei $\gamma = 0.4$, $\varepsilon = 2\gamma$ und $T = 0$ für verschiedene Phasen $\theta = 0, \pi, 3\pi/2$. ω_c sowie phasengemitteltes $\bar{\sigma}'_{xx}$.

Näherung für unseren SWNT in einem Kryostaten, da $T_{\text{Kryo}} \simeq 7 \text{ mK} \ll 65 \text{ mK} = T_0$, wobei T_0 die Übergangstemperatur vom klassischen zum Quantenregime war (Kapitel 1). Wird die Temperatur des Bades allerdings erhöht, erhält man, wie in Abb. 2.8 zu sehen, ähnliche Kurven wie bei $T = 0$, die allerdings durch zusätzliche thermische Besetzungen von höheren Energiezuständen etwa mit einem Faktor $\coth[T_0/2T]$ gestreckt werden. Der Einfluss der Phasenverschiebung des parametrischen Antriebs θ äußert sich in einer Phasenverschiebung bezüglich der Maxima und Minima von σ'_{xx} . Dies ist ebenfalls in Abb. 2.8 gezeigt, wo bei festem $\gamma = 0.4$ und $\varepsilon = 0.8$ (quasi-kritisch) die Phase θ variiert wurde. Zusätzlich sind noch die über 8 Phasen $\theta = n\pi/4$, $n = 0, 1, \dots, 7$ gleichmäßig gemittelte Fluktuationen $\bar{\sigma}'_{xx}$ gezeigt. Diese Mittelung über die Phasen ist gleichbedeutend mit einer zeitlichen Mittelung der Fluktuationen,

$$\bar{\sigma}'_{xx}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t dt' \bar{\sigma}'_{xx}(t'), \quad (2.116)$$

welche, sobald das System im Gleichgewicht ist, konstant ist. In der Nichtgleichgewichtssituation des Aufschaukelns, siehe den Fall $\varepsilon = 2\gamma$ in Abb. 2.7, steigt $\bar{\sigma}'_{xx}(t)$ aber linear mit der Zeit an. Daraus lässt sich eine konstante Aufschaukelgeschwindigkeit

$$v_{\uparrow} = \frac{\bar{\sigma}'_{xx}(t_2) - \bar{\sigma}'_{xx}(t_1)}{t_2 - t_1} \quad (2.117)$$

berechnen. Da das parametrische Resonanz-Phänomen von der Kombination aus parametrischem Antrieb und Kopplung System-Bad abhängt [41], sollte v_{\uparrow} von der Kopplung abhängen. Tatsächlich findet man näherungsweise

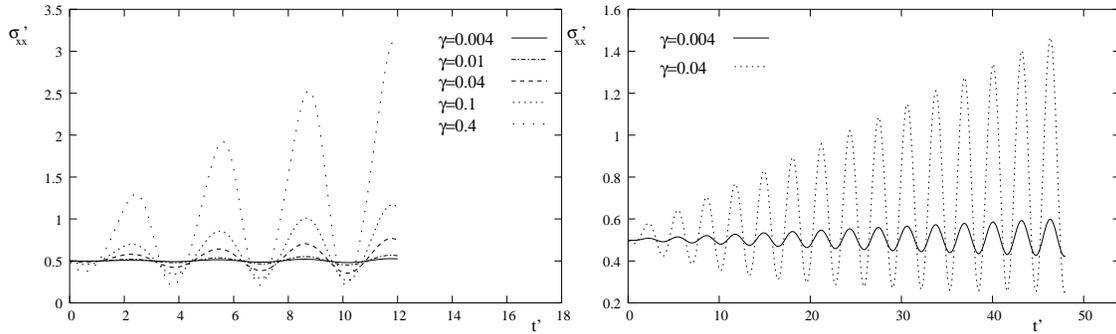


Abbildung 2.9: Links: Zeitlicher Verlauf von σ'_{xx} bei $T = 0$ und festem $\varepsilon = 2\gamma$ für verschiedene Dämpfungsparameter γ .

Rechts: Schwache Dämpfung für sonst gleiche Parameter, über längere Zeitspanne.

$$v_{\uparrow} = v_{\uparrow}(\gamma) \simeq \frac{\gamma}{4} \quad (2.118)$$

aus Abb. 2.9, wo bei festem $\varepsilon = 2\gamma$ (Aufschaukelphase lang, da quasi-kritisch) σ'_{xx} für verschiedene Werte von γ gezeigt sind. Dies ist hilfreich, um Zeitskalen abzuschätzen, innerhalb derer Experimente ausgeführt werden müssten, siehe unten. Was die anderen Varianzen σ'_{pp} und σ'_{xp} betrifft, so ergeben sich für sie ebenfalls periodische Funktionen, mit entsprechenden Aufschaukelphänomenen, siehe Abb. 2.10. Dabei treten in den einzelnen Termen κ_{ij} Divergenzen auf (aufgrund der dort enthaltenen Funktionen $\bar{f}_{1,2}$ mit Nullstellen-behaftetem Nenner $f_1(t)$), die aber in den in Gl. (2.112 ff.) auftretenden Kombinationen unter Verwendung von Gl. (2.26) herausfallen:

$$\begin{aligned} \kappa_{11} + 2\dot{f}_1\kappa_{12} + \dot{f}_1^2\kappa_{22} = & \frac{1}{2} \int_0^t ds \int_0^t du \exp(\gamma(s+u))K(s-u) \times \left[(\dot{f}_1(t))^2 f_2(s)f_2(u) \right. \\ & \left. - 2\dot{f}_1(t)\dot{f}_2(t)f_1(s)f_2(u) + (\dot{f}_2(t))^2 f_1(s)f_1(u) \right], \end{aligned} \quad (2.119)$$

$$\begin{aligned} f_1\kappa_{12} + f_1\dot{f}_1\kappa_{22} = & \frac{1}{2} \int_0^t ds \int_0^t du \exp(\gamma(s+u))K(s-u) \times \left[(f_1(t)\dot{f}_1(t)f_2(s)f_2(u) - \right. \\ & \left. - (f_1(t)f_2(t) + \dot{f}_2(t)f_1(t))f_1(s)f_2(u) + f_2(t)\dot{f}_2(t)f_1(s)f_1(u) \right]. \end{aligned}$$

Die Werte ohne parametrischen Antrieb ($\varepsilon = 0$) sind $\sigma'_{pp}(\varepsilon = 0) = 0.9$ und $\sigma'_{xp}(\varepsilon = 0) = 0$, die parametrische Resonanz führt also neben Squeezing und Verstärkungen von Orts- und Impuls-Fluktuationen auch zu einer zeitlich periodischen, nicht-verschwindenden Orts-Impuls-Korrelation. In Abb. 2.10 rechts sind alle drei Korrelationsfunktionen für $\varepsilon = \gamma$ (Aufschaukeln quasi instantan) zu sehen, und man erkennt die Gültigkeit von $\sigma'_{xp} \sim \dot{\sigma}'_{xx}$ (nach Heisenberg-Gleichung ohne Dämpfung, siehe [90]) auch im Fall des an das Bad gekoppelten Oszillators. Desweiteren ist noch das Heisenbergsche Unschärfeprodukt $\Delta x' \Delta p' = \sqrt{\sigma'_{xx} \sigma'_{pp}}$ eingezeichnet, welches ebenfalls periodisch variiert, wobei aber die Heisenbergsche Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ zu jedem Zeitpunkt erfüllt ist.

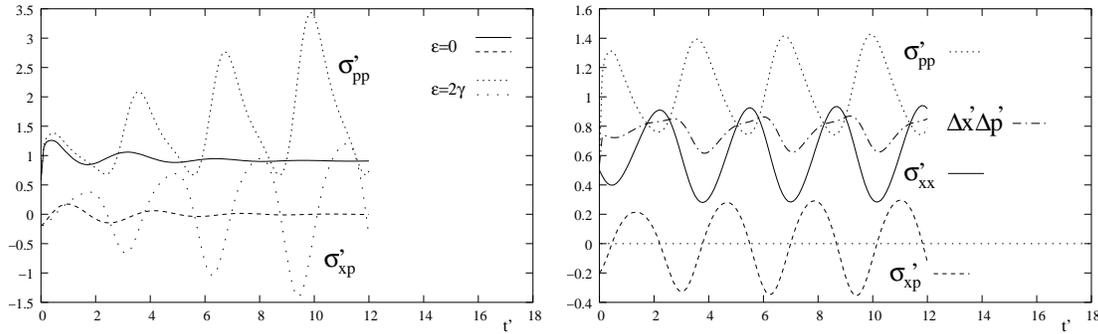


Abbildung 2.10: Links: Zeitlicher Verlauf von σ'_{pp} und σ'_{xp} bei $T = 0$ und $\gamma = 0.4$ für $\varepsilon = \{0, 2\gamma\}$. Rechts: Alle σ'_{xx} , σ'_{xp} und σ'_{xx} für $\varepsilon = \gamma = 0.4$. Desweiteren ist das Unschärfeprodukt $(\Delta x \Delta p)'$ eingezeichnet.

Interpretation

Wir haben also gezeigt, dass Fluktuationen im Prinzip tatsächlich durch parametrische Resonanz verstärkt werden können. Angesichts der Periodizität von σ_{xx} muss man in einem Experiment allerdings entweder in einer stroboskopischen Messung die gleichzeitige Korrelation $\sigma_{xx}(t) = \langle x(t)x(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2$ direkt messen (und zwar am besten dann, wenn $\sigma_{xx}(t)$ maximal ist) oder man bestimmt den gemittelten Ausdruck $\bar{\sigma}_{xx}$, was einer Messung eines dynamischen Powerspektrums bei Null, $S_{\text{dyn}}(\omega = 0) \sim \int_{\tau} dt \exp(i \cdot 0 \cdot t) \sigma_{xx}(t)$, entspräche. In jedem Fall lässt sich abschätzen, ob die Verstärkungen für eine Detektion überhaupt ausreichen. Dabei gehen wir davon aus, dass der Verstärkungsfaktor c_V ebenfalls dadurch eingeschränkt sein wird, dass die parametrische Resonanz zusammenbricht, sobald die durch $l_V \equiv l_0 \cdot \sqrt{c_V}$ definierte Längenskala in den Bereich der Längenskala l_4 kommt, auf welcher der in diesem Kapitel nicht berücksichtigte quartische Term des Potentials dieselbe Größenordnung hat wie der harmonische Term, also $m\omega_0^2 l_4^2 \simeq U_4(l_4)$. Greift man auf Kapitel 3, Gl. (3.6) vor, so ergibt sich für diese Skala $l_4^2 = 0.024 L^2$. Ausgehend von der Bedingung $l_V \simeq 0.1 l_4$ erhält man damit einen Verstärkungsfaktor von

$$c_V = 2.4 \cdot 10^{-4} \left(\frac{L}{l_0} \right)^2 = 2.4 \cdot 10^4, \quad (\text{SWNT}) \quad (2.120)$$

der durch parametrische Resonanz erreicht werden kann. Dies entspricht also im Falle unseres SWNT einer Erhöhung der Fluktuationen von $\sigma_{xx} = (0.01\text{nm})^2 \longrightarrow (1\text{nm})^2$, genau der gewünschten Verstärkung, da eine Auslenkung im nm-Bereich sicherlich messbar ist. Allerdings muss dabei gewährleistet werden, dass die Temperatur des Systems weder durch den parametrischen Antrieb noch durch den Messvorgang selbst signifikant erhöht wird, damit man im Quanten-Bereich $T \ll T_0$ bleibt. Der Zeitbereich t_\uparrow , für welche diese Bedingung während einer dynamischen Messung zu halten hat, lässt sich über die Aufschaukelgeschwindigkeit v_\uparrow zu

$$\frac{t_\uparrow}{\omega_0^{-1}} = \frac{c_V}{2v_\uparrow} \quad (2.121)$$

berechnen. Das ergibt für unseren SWNT eine Zeit von $t_\uparrow \simeq Q \cdot 6 \mu\text{s}$, also wegen den zu erwartenden hohen Q -Faktoren von SWNTs etwa 10 ms. Abgesehen von diesen Schwierigkeiten müssten natürlich sowohl der Anregungsmechanismus für den parametrischen Antrieb als auch der Messmechanismus nahe dem SWNT angebracht werden, was zu weiteren technischen Schwierigkeiten führen kann. Bezüglich neuerer Anwendungen in aktuellen Experimenten in nanomechanischen Systemen wurden kürzlich parametrische Resonanzen eines einseitig befestigten Nanodrahtes realisiert [89], aber auch für ein Feld aus gekoppelten Balkenresonatoren wurde experimentell [11] und theoretisch [56] mit parametrischer Resonanz gearbeitet.

Kapitel 3

Quanteneffekte nahe der Euler-Instabilität

In Kapitel 1 hatten wir gesehen, dass die quantenmechanischen Nullpunkts-Fluktuationen für SWNTs der Länge 100 nm sehr klein sind ($l_0 \simeq 10^{-2}$ nm), allerdings durch Kompression bis in die Nähe der Euler-Instabilität ($F \rightarrow F_c$) verstärkt werden können. Die harmonische Näherung, mit der bis zu diesem Zeitpunkt gerechnet wurde, bricht dann zusammen; bei welchem Abstand $|F - F_c|$ dies geschieht, muss noch bestimmt werden. Im Folgenden werden wir also höhere Terme in der Entwicklung der Lagrangefunktion miteinbeziehen, welche das System insgesamt stabilisieren. Desweiteren werden wir den Balken dann im Bereich der Euler-Buckling-Instabilität analysieren, die relevanten Energie- und Längenskalen untersuchen und uns mit weiteren auftretenden Quanteneffekten wie Makroskopischer Quanten-Kohärenz (MQC) beschäftigen. Zuletzt werden wir noch auf die Nelsonsche Quantenmechanik kommen, die einen alternativen Zugang aus der statistischen Mechanik zur Berechnung quantenmechanischer Nullpunkts-Fluktuationen bietet.

3.1 Nanobalken nahe der Euler-Instabilität

Zunächst zwingt uns die Instabilität des Systems, gekennzeichnet durch das Verschwinden der Frequenz der fundamentalen Mode ($\omega_1(F \rightarrow F_c) \rightarrow 0$), zusätzlich zu den quadratischen Termen $\sim (\phi')^2, (\phi'')^2$ des Feldes der transversalen Auslenkung ϕ noch die nächsthöhere Ordnung $\sim (\phi')^4, (\phi')^2(\phi'')^2$ in der Lagrangefunktion Gl. (1.27) zu berücksichtigen. Dies bedeutet den Übergang von einer freien zur wechselwirkenden Feldtheorie, da nun in der Normalmodenentwicklung Gl. (1.44) Terme im Hamiltonian auftreten, die sowohl Selbstkopplungen der Moden, $\sum_k \mathcal{A}_k^4$, als auch gekoppelte Wechselwirkungen, $\sum_{k,l} \mathcal{A}_k^2 \mathcal{A}_l^2$, enthalten. Damit lässt sich das Problem nicht mehr exakt lösen. Glücklicherweise befinden wir uns hier in der Situation, dass in der Nähe der Euler-Instabilität die Frequenzen von höheren Moden endlich bleiben, während ω_1 verschwindet und daher die gesamte Niederenergiephysik von der fundamentalen Mode bestimmt wird. In der Sprache der diagrammatischen Feldtheorie bedeutet dies, dass nur Diagramme, die den Phononenpropagator

$\sim 1/(\omega^2 - \omega_1^2)$ der fundamentalen Mode enthalten, relevante Beiträge für $\omega \rightarrow 0$ liefern können. Wir werden also für unsere Zwecke höhere Moden vernachlässigen und wählen den vereinfachenden Ansatz $\phi(t, s) = \mathcal{A}_1(t)g_1(s)$ mit der Modenfunktion $g_1(s)$ aus Kapitel 1. Das Problem wird dadurch auf ein Einteilchenproblem reduziert, und man erhält mit der Definition des kanonischen klassischen Impulses

$$\mathcal{P} = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathcal{A}}_1} L = m_{\text{eff}} \dot{\mathcal{A}}_1 \quad (3.1)$$

die klassische Hamiltonfunktion des quartischen Oszillators

$$H_{\text{cl}} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m_{\text{eff}}} + \frac{1}{2}m_{\text{eff}}\omega_1^2\mathcal{A}_1^2 + \frac{b_4}{4}\mathcal{A}_1^4 \quad (3.2)$$

mit einer effektiven Masse $m_{\text{eff}} \simeq 10^{-22}\text{kg}$ und einer Frequenz $\omega_1 \simeq \sqrt{\varepsilon} \cdot 10^{-10}\text{s}^{-1}$ (für SWNTs), sowie einem noch zu bestimmendem anharmonischen Koeffizienten b_4 .

3.1.1 Bestimmung des anharmonischen Koeffizienten

Aus dem nichtlinearen Energiefunktional des Balkens unter longitudinaler Kompression erhalten wir zwei Beiträge zur Ordnung \mathcal{A}_1^4 [66]. Zum einen gibt es den durch die Kompression destabilisierenden Beitrag der äußeren Arbeit, die mit der Kraft F verbunden ist, gegeben durch

$$W_A = -\frac{F}{8} \int_0^L (g_1'(s))^4 ds \cdot \mathcal{A}_1^4. \quad (3.3)$$

Wir verwenden für die Modenfunktion g_1 den Näherungsausdruck Gl. (1.57) und setzen darin $\varepsilon = 0$, handeln uns also Fehler der Ordnung ε^2 ein, welche wir nahe der Instabilität $|\varepsilon| \ll 1$ vernachlässigen können. Mit $g_1(s) = \sin^2(\pi s/L)$ ergibt sich also

$$W_A = -\frac{3}{4} \left(\frac{\pi}{L}\right)^4 FL \cdot \mathcal{A}_1^4. \quad (3.4)$$

Der Betrag ist negativ, wie erwartet, da die äußere Kraft alleine eine immer größere Auslenkung hervorrufen würde. Dem wirkt allerdings die Biege-Energie des Balkens entgegen,

$$E_B = \frac{\mu}{2} \int_0^L (g_1'(s))^2 (g_1''(s))^2 ds \cdot \mathcal{A}_1^4 = \left(\frac{\pi}{L}\right)^4 F_c L \cdot \mathcal{A}_1^4, \quad (3.5)$$

die W_A überkompensiert, sodass der quartische Term insgesamt zu einem positiven anharmonischen Koeffizienten

$$b_4 = \left(\frac{\pi}{L}\right)^4 F_c L (1 + 3\varepsilon) \simeq \left(\frac{\pi}{L}\right)^4 F_c L, \quad (3.6)$$

führt, der ein stabiles System beschreibt. Terme der Ordnung $|\varepsilon|$ können nahe der Instabilität wieder vernachlässigt werden, allerdings erkennt man hier noch, dass bei überkritischer Kompression $\varepsilon < -1/3$ das Energiefunktional bis zu höherer als nur der vierten

Ordnung in ϕ entwickelt werden muss, um Stabilität zu gewährleisten. Dies spielt aber für unseren Fall keine Rolle, da wir nur an der Analyse des Balkens in unmittelbaren Nähe der Instabilität $|\varepsilon| \ll 1$ interessiert sind. Der Zahlenwert für b_4 im Fall des SWNT ist

$$b_4 \simeq 2 \cdot 10^{13} \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad (3.7)$$

ein in dieser Form recht aussageloser Wert, der aber die relevanten Energie- und Längenskalen bestimmt, wie man gleich sehen wird.

3.1.2 Hamiltonoperator und kritische Skalen

Der quantenmechanische Hamiltonoperator ergibt sich aus Gl. (3.2) trivialerweise durch die Einführung des zur Koordinaten \mathcal{A}_1 kanonisch konjugierten Impulses

$$\mathcal{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}_1} \quad (3.8)$$

der die Vertauschungsrelation $[\mathcal{A}_1, \mathcal{P}] = i\hbar$ erfüllt. Definiert man wie in Kapitel 1 mit ω_0 die Skala, auf der ω_1 wie $\omega_1 = \sqrt{\varepsilon} \cdot \omega_0$ verschwindet (bei der Randbedingung freier Enden war einfach $\omega_0 = \omega(F=0)$), für unsere fest eingespannte Randbedingung ist $\omega_0 \simeq 1.02 \cdot \omega(F=0)$, so lässt sich H schreiben als

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{A}_1^2} + \frac{\varepsilon}{2} m_{\text{eff}} \omega_0^2 \mathcal{A}_1^2 + \frac{b_4}{4} \mathcal{A}_1^4. \quad (3.9)$$

Damit lässt sich feststellen, dass das Problem des eingespannten Balkens unter fast kritischer kompressiver Kraft, ungeachtet der Größenordnungen der relevanten Skalen, dem Einteilchenproblem im effektiven Potential des anharmonischen Oszillator äquivalent ist. Ein ähnlicher Hamiltonian für dieses Problem ist bereits von Carr *et al.* in [13] hergeleitet worden, allerdings auf andere Weise. Dort ist kein vollständiges Energiefunktional abgeleitet, sondern der quartische Term unter Einführung einer “dynamischen Länge” (einer effektiven Verlängerung des Balkens durch Auslenkung, bedingt durch eine Parametrisierung des Balkens mit raumfesten Endpunkten, die der physikalischen Situation aber nicht angepasst ist, siehe Kapitel 1) von Hand zur parametrisierungsunabhängigen linearen Beschreibung hinzugefügt. Desweiteren sind die dort aufgelisteten Zahlenwerte nicht unter der von uns als dem Experiment angemessenen Randbedingung von eingespannten Enden berechnet worden, sondern unter derjenigen ohne Momente an den Enden (die wir nur für einige analytische Darstellungen benutzt hatten). Außerdem sind sie nicht für SWNTs sondern für, wenn auch ultrakurze, MWNTs gegeben und gehen daher nicht auf die Problematik der Berechnung des Biegewiderstandes μ ein, in der ja die sensible Größe der effektiven Wand-dicke eines SWNT eingeht. Obwohl das letztlich verwendete Modell grundsätzlich völlig analog ist, ist ein direkter quantitativer Vergleich unserer Ergebnisse mit jenen aus [13] aus diesen Gründen nicht möglich.

In harmonischer Näherung würde man nun mit $l_0 = (\hbar/m_{\text{eff}}\omega_0)^{1/2}$ die geeignete Längenskala einführen, auf der die kinetische Energie sowie der harmonische Anteil des Potentials

die gleiche Größenordnung haben. Nach demselben Prinzip führen wir hier eine charakteristische Längenskala

$$l_\varepsilon = l_0(\Delta\varepsilon)^{-\frac{1}{4}} \quad (3.10)$$

ein, auf der die kinetische Energie die gleiche Größenordnung haben soll wie der quartische Anteil des Potentials, unter Beibehaltung der Faktoren $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ in Gl. (3.9). Dabei ist $\Delta\varepsilon$ ein charakteristischer dimensionsloser Skalierungsfaktor, der, wie sich zeigen wird, die Größe des kritischen Regimes um die kritische Kraft bestimmt. Definiert man sich demgemäß eine dimensionslose Koordinate y durch

$$\mathcal{A}_1 = l_\varepsilon \cdot y, \quad (3.11)$$

so ergibt sich der Skalierungsfaktor durch Energievergleich zu

$$\Delta\varepsilon \equiv \left(\frac{b_4 l_0^4}{\hbar\omega_0} \right)^{\frac{2}{3}} = \left(\frac{4\hbar\omega_0}{F_c L} \right)^{\frac{2}{3}} = (2\pi)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{l_0}{L} \right)^{\frac{4}{3}}, \quad (3.12)$$

die neue Längenskala ist daher gegeben durch

$$l_\varepsilon = 0.61 \left(\frac{L}{l_0} \right)^{\frac{1}{3}} l_0. \quad (3.13)$$

Hier ist zunächst die anormale Potenz in der Abhängigkeit von \hbar , $\Delta\varepsilon \sim \hbar^{2/3}$ zu bemerken, wodurch sowohl Längen- als auch Energieskalen mit einer unüblichen Potenz von \hbar skalieren. Tatsächlich lautet der Hamiltonoperator in der dimensionslosen Koordinate y

$$H = \hbar\omega_\varepsilon \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} y^2 + \frac{1}{4} y^4 \right) \quad (3.14)$$

wobei die charakteristische Frequenzskala durch

$$\omega_\varepsilon = \frac{\hbar}{m_{\text{eff}} l_\varepsilon^2} = \omega_0 \sqrt{\Delta\varepsilon} \quad (3.15)$$

festgelegt ist. Aus dieser Form des Hamiltonians ist klar, dass der in Kapitel 1 gesuchte Wert, bis zu dem man sich der kritischen Kraft nähern kann, ohne den Gültigkeitsbereich der harmonischen Näherung zu verlassen, durch $\varepsilon \simeq \mathcal{O}(\Delta\varepsilon)$ gegeben ist. Obwohl $\Delta\varepsilon \sim L^{-2/3}$ mit kürzeren Balken größer wird, ist der Zahlenwert selbst für sehr kurze SWNTs ausserordentlich klein, $\Delta\varepsilon \simeq \mathcal{O}(10^{-5})$. Einerseits ist dadurch die Skala der transversalen Auslenkung um mehr als einen Faktor zehn erhöht, der gewünschte Effekt angesichts der für Messungen ungeeigneten Skala $l_0 \simeq 10^{-2}$ nm ohne longitudinale Kompression. Andererseits erfordert die Beobachtung von Quanteneffekten nahe der Euler-Instabilität eine außerordentliche Feinabstimmung der äußeren Parameter. So beträgt ω_ε nur noch 1/100 oder weniger der ursprünglichen Skala ω_0 , was zu dem schon in Kapitel 1 angedeuteten Problem der sehr tiefen Temperaturen führt, die benötigt werden, um im Limes $k_B T \ll \hbar\omega_\varepsilon$

	$\sqrt{\Delta\varepsilon}$	l_ε [nm]	$\omega_\varepsilon/2\pi$ [MHz]	T_ε [mK]
SWNT	$0.6 \cdot 10^{-2}$	0.13	8.5	0.4
MWNT	$3.3 \cdot 10^{-4}$	0.055	0.24	0.011
Si-Balken	$3.1 \cdot 10^{-5}$	0.0056	0.007	$3 \cdot 10^{-4}$
skaliert wie	$L^{-1/3}$	$L^{2/3}$	$L^{-7/3}$	$L^{-7/3}$

Tabelle 3.1: Parameter-Werte der kritischen Skalen und deren Skalierung mit der Balkenlänge.

zu bleiben, in dem Quanteneffekte dominieren. Bezeichnet man generell die Energieskala mit

$$\xi_\varepsilon^{-1} = \hbar\omega_\varepsilon = k_B T_\varepsilon \quad (3.16)$$

und führt damit auch die Temperaturskala T_ε ein, unterhalb der Quanteneffekte relevant werden, so ergibt sich ein selbst für SWNTs sehr kleiner Wert von $T_\varepsilon < 1\text{mK}$. Dieser für Messungen an nanomechanischen Systemen experimentell noch unzugängliche Wert legt nahe, nach indirekten Nachweisen von Quanteneffekten oder Quantenkorrekturen zum klassischen Verhalten zu suchen, sofern man sich im Bereich $\varepsilon \simeq \mathcal{O}(\Delta\varepsilon)$, also sehr nahe der kritischen Kraft F_c befindet.

3.2 Anharmonischer Oszillator

Wir betrachten das Problem des dimensionslosen Hamiltonians Gl. (3.14)

$$h = \frac{1}{\xi_\varepsilon^{-1}} H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + v(y) \quad (3.17)$$

mit dem Potential des anharmonischen Oszillators

$$v(y) = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} y^2 + \frac{1}{4} y^4 \quad (3.18)$$

welches im Fall $\varepsilon/\Delta\varepsilon < 0$ die aus der Landau-Theorie bekannte Doppelmuldenform hat, siehe Abb. 3.1. Tatsächlich entspricht unser Hamiltonian Gl. (3.14) genau dem effektiven Hamiltonoperator des Transfermatrixproblems eines eindimensionalen klassischen Ginzburg-Landau-Funktionalintegrals [58]. Der Ordnungsparameter ist in unserem Fall die transversale Auslenkung in Balkenmitte, und die übliche Rolle der Temperaturdifferenz $(T - T_c)/T_c$ übernimmt die dimensionslose Distanz $\varepsilon/\Delta\varepsilon$ zur kritischen Kraft F_c . Der Durchgang dieses Parameters durch Null, das heißt das Erreichen und überschreiten der kritischen Kraft, sorgt für die Bifurkation des stabilen Minimums bei $y = 0$ in die zwei neuen, symmetrischen Minima bei

$$y_{\min,\pm} = \pm y_{\min} = \pm \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

Da der neue klassische Grundzustand der Ruhe-Lage in einem dieser Minima entspricht, teilt dieser nicht mehr die Symmetrie des Hamiltonians Gl. (3.17, 3.18). Dies ist die charakteristische spontane Symmetriebrechung der Landau-Theorie. In Analogie werden wir im

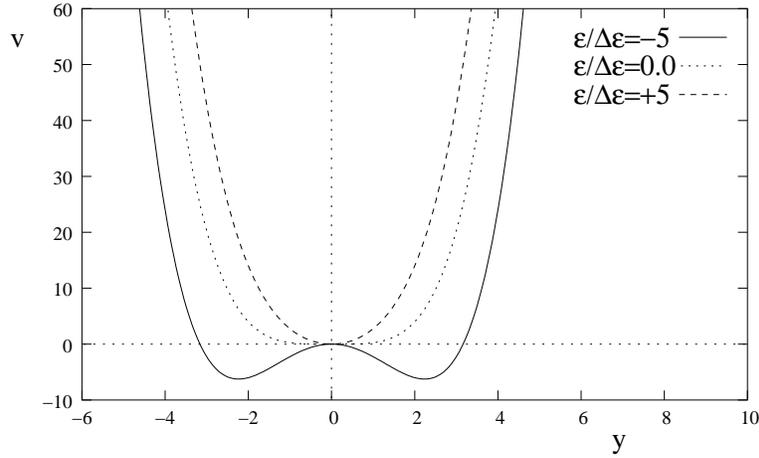


Abbildung 3.1: Potential des anharmonischen Oszillators $v(y) = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} y^2 + \frac{1}{4} y^4$ für die drei Werte des Parameters $\varepsilon/\Delta\varepsilon = \{5, 0, -5\}$.

Folgenden von der symmetrischen Phase sprechen, wenn wir uns unterhalb der kritischen Kraft befinden ($F < F_c$), und von der symmetriegebrochenen Phase, falls die Kraft über die Euler-Instabilität hinaus erhöht wird ($F > F_c$).

An dieser Stelle kann man sich fragen, ob nicht das zweidimensionale Problem $y \rightarrow \mathbf{y}$ (\mathbf{y} ist ein Vektor senkrecht zur longitudinalen Ruhe-Lage des Balkens) beziehungsweise die Beschreibung durch ein komplexes Feld $\phi(s)$ die korrekte Beschreibung des Problems liefert [51]. Insbesondere lautet die Frage, ob es dann Goldstone-Moden gibt, die in der symmetriegebrochenen Phase der kräftefreien Bewegung auf der Kreislinie der Minimalwerte von v in der komplexen Ebene entsprechen. Im Prinzip ist im Moment des Erreichens der kritischen Kraft noch keine Auslenkungsrichtung ausgezeichnet. Im realen Experiment [2] allerdings wird durch die Nichteinhaltung mathematisch perfekter Randbedingungen, die ja unserer Betrachtung zugrunde liegen, eine Richtung ausgezeichnet werden. Außerdem handelt es sich im symmetriegebrochenen Fall ja nicht wirklich um ein Teilchen im Potential (Abb. 3.1); an den realen Balken-Enden entstehen durch die Einspannung möglichen Torsionen entgegenwirkende Spannungen, so dass man nicht von kräftefreier Radialbewegung des Balkens sprechen kann. Daher verzichten wir für reale Balken auf eine Ausweitung der Beschreibung auf zwei Dimensionen (komplexes Feld), bleiben also eindimensional.

Eine thermodynamische, vollständige Behandlung des anharmonischen Oszillators (für reales und komplexes Feld) findet sich in [73]. Grundsätzlich sind im anharmonischen Potential keine analytischen Lösungen mehr möglich. Aber auch Störungstheorie ist problematisch: so ist etwa selbst in der symmetrischen Phase eine störungstheoretische Behandlung der Anharmonizität y^4 unzulässig, da der Konvergenzradius der Reihe Null ist, denn für negatives ε wird $y = 0$ als Grundzustandslage instabil. In der symmetriegebrochenen Phase dagegen kann man klassisch davon ausgehen, den Balken in einem der Minima zu finden, sofern thermische Anregungen $k_B T$ sehr klein im Vergleich zur Potentialbarriere $V_b = \xi_\varepsilon^{-1} v_b$

sind, welche durch die dimensionslose Barriere

$$v_b = \frac{1}{4} \left(\frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right)^2 \quad (3.20)$$

gegeben ist. Eine quantenmechanische Beschreibung der Niederenergiephysik des Systems für eine ausreichend hohe Barriere und tiefe Temperaturen ist das aus den beiden Minima gebildete Zweizustandssystem, womit wir uns später beschäftigen. Zunächst aber betrachten wir die mittlere quadratische Auslenkung und die Anregungsfrequenzen des Systems in der Nähe der Instabilität.

3.2.1 Mittlere quadratische Auslenkung

Wir betrachten die Fluktuationen der transversalen Auslenkung in der Balkenmitte

$$\sigma^2 = \langle y^2(L/2) \rangle l_\varepsilon^2 \quad (3.21)$$

zunächst im Limes sehr kleiner Temperaturen ($T \rightarrow 0$). In der symmetrischen Phase divergieren die quantenmechanischen Nullpunkts-Fluktuationen in harmonischer Näherung, sobald man die kritische Kraft erreicht ($\varepsilon \rightarrow 0$). Dies entspricht natürlich der Situation, im Potential Gl. (3.18) den quartischen Term zu ignorieren, sodass man in den neuen Skalierungen

$$\sigma_{\text{harm},>}^2 = \frac{l_\varepsilon^2}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.22)$$

erhält. In der symmetriegebrochenen Phase befindet sich der Balken in neuer klassischer Ruhe-Lage entweder im linken oder rechten Minimum des Doppelmuldenpotentials. Betrachtet man wie hier Auslenkungen um die ehemals stabile Lage $y = 0$, so erwartet man $\langle y^2 \rangle = \langle y_{\text{min}}^2 \rangle$, also

$$\sigma_{\text{klass},<}^2 = l_\varepsilon^2 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|. \quad (3.23)$$

Für die numerisch exakte Lösung muss zunächst der Hamiltonoperator Gln. (3.17, 3.18) diagonalisiert werden. Dies ist aufgrund seiner Tridiagonalform einfach [67] und kann ohne größeren Rechenaufwand für variierendes $\varepsilon/\Delta\varepsilon$ durchgeführt werden. Bezeichnen also $\lambda_n, |\psi_n\rangle$, $n = 0, 1, \dots$ die numerisch exakten dimensionslosen Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamiltonians Gl. (3.17), dann gilt natürlich für $T = 0$

$$\sigma_{\text{num}}^2 = l_\varepsilon^2 \langle \psi_0 | y^2 | \psi_0 \rangle, \quad (3.24)$$

da aufgrund der Symmetrie des Potentials der Mittelwert $\langle \psi_0 | y | \psi_0 \rangle$ verschwindet. Wie in Abb. 3.2 zu sehen ist, interpoliert die exakte Lösung zwischen den beiden Approximationen Gln. (3.22, 3.23). Insbesondere bleibt sie bei F_c ($\varepsilon = 0$) endlich,

$$\sigma_{T=0}(F = F_c) = 0.68 l_\varepsilon, \quad (3.25)$$

was etwa 0.1 nm für unseren typischen SWNT entspricht und damit im Bereich der experimentellen Nachweisbarkeit (siehe Diskussion in Kapitel 1) liegt. Desweiteren ist in Abb. 3.2 das Zusammenbrechen der harmonischen Näherung in der symmetrischen Phase bei $\varepsilon \simeq \Delta\varepsilon$ gut erkennbar.

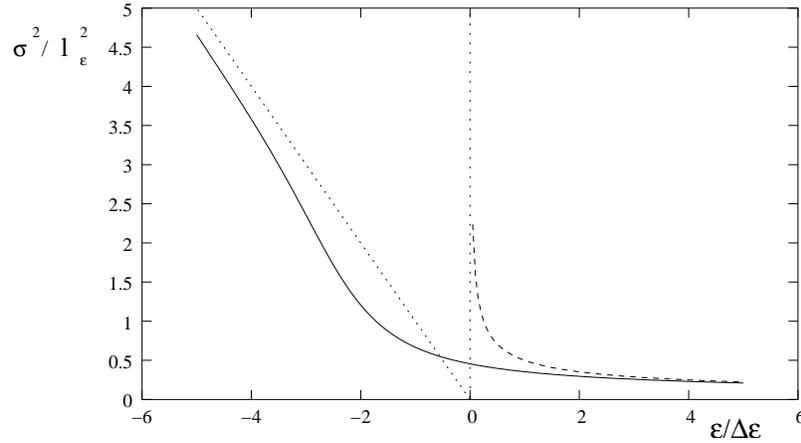


Abbildung 3.2: Nullpunkts-Fluktuationen der Balkenmitte in der Nähe der Euler-Instabilität. Die durchgezogene Linie ist die numerisch exakte Lösung nach Gl. (3.24), die gestrichelte Linie zeigt die harmonische Näherung für $F < F_c$. Das klassische Minimum in der symmetriegebrochenen Phase, $\sigma^2 \sim y_{\min}^2$ ist durch die gepunktete Linie angezeigt.

Thermische Anregungen

Mit steigender Temperatur werden auch die angeregten Zustände $|\psi_n\rangle$, $n > 0$ thermisch bevölkert. Bezeichnet $t = T/T_\varepsilon$ die dimensionslose Temperatur auf geeigneter Skala, so ist der Besetzungsgewichtung im thermischen Gleichgewicht gegeben durch

$$\rho_n = \frac{1}{N} \exp \left\{ -\frac{\lambda_n}{t} \right\} \quad (3.26)$$

mit $N = \sum_n \exp(-\lambda_n/t)$. Damit lassen sich die thermischen Fluktuationen berechnen zu

$$\sigma_{\text{therm}}^2 = l_\varepsilon^2 \sum_n \rho_n \langle \psi_n | y^2 | \psi_n \rangle \quad (3.27)$$

Die Ergebnisse für σ_{therm}^2 sind in Abb. 3.3 abgebildet, zum einen als Funktion des Parameters $\varepsilon/\Delta\varepsilon$ für verschiedene Temperaturen, zum anderen als Funktion der Temperatur für diverse $\varepsilon/\Delta\varepsilon$. Dabei ist festzustellen, dass mit steigender Temperatur zunächst die boomerangartige Form der Kurve von $\sigma^2(T=0)$ aufweicht, indem σ^2 für $F < F_c$ im Vergleich zu $F > F_c$ deutlich erhöht wird. Insbesondere ist auffällig, dass für $\varepsilon/\Delta\varepsilon < -3$ die Fluktuationen zunächst sinken, da mit steigender Temperatur die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Barrierenbereich um $y = 0$ erhöht wird. Erst ab $T \simeq \mathcal{O}(10 - 100 T_\varepsilon)$ sieht das Teilchen die Details des Potentialbodens nicht mehr. Allerdings gilt nicht mehr $\sigma^2(t) \sim t$, wie für den Fall der harmonischen Näherung (klassischer Gleichverteilungssatz, siehe Abb. 3.3) sondern man findet $\sigma^2(t) \sim \sqrt{t}$. Die harmonischen Näherung für $\varepsilon \geq \Delta\varepsilon$ ist natürlich nur in der Tieftemperaturnäherung gültig, das abweichende Verhalten in Abb. 3.3 ist daher kein Widerspruch zu obigen Aussagen.

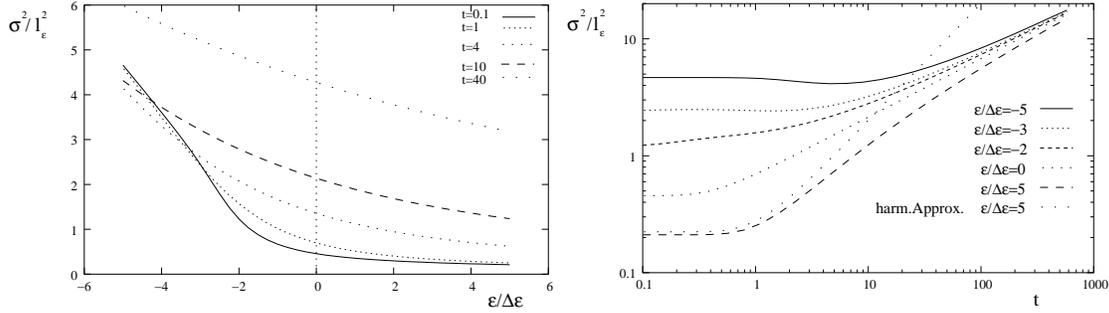


Abbildung 3.3: Mittlere quadratische Auslenkung σ^2 . Links für verschiedene Temperaturen $T/T_\epsilon = 0.1, 1, 4, 10, 40$ als Funktion von $\epsilon/\Delta\epsilon$, rechts für verschiedene $\epsilon/\Delta\epsilon = \{-5, -3, -2, 0, 5\}$ als Funktion der Temperatur $t = T/T_\epsilon$, wobei zusätzlich die harmonische Näherung $\sim \coth(\sqrt{5}/(2t))$ im Fall $\epsilon/\Delta\epsilon = 5$ eingezeichnet ist.

3.2.2 Anregungsfrequenzen

Eine zweite wichtige Möglichkeit zu untersuchen, ob sich im Verhalten des Systems quantenmechanische Effekte zeigen, ist die Beobachtung der niedrigsten Eigenfrequenz des Balkens in der Nähe der Euler-Instabilität. Betrachten wir zuerst die symmetrische Phase. Klassisch ist die kleinste Anregungsfrequenz dann natürlich die Frequenz der fundamentalen Mode, $\omega_1(F)$. In harmonischer Näherung wissen wir, dass ω_1 in der Nähe der Instabilität wie

$$\omega_1(F \rightarrow F_c) = \omega_\epsilon \sqrt{\frac{\epsilon}{\Delta\epsilon}} \quad (3.28)$$

verschwindet. Wir definieren die numerisch exakte kleinste Anregungsfrequenz über

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(\lambda_1 - \lambda_0)\xi_\epsilon^{-1} \quad (3.29)$$

und vergleichen ihr Verhalten mit dem der harmonischen Näherung in Abb. 3.4. Zunächst stimmen ω und ω_1 noch bis relativ nahe ($\epsilon/\Delta\epsilon > 4$) der Instabilität gut überein. Während aber ω_1 nun verschwindet, weicht ω von der harmonischen klassischen Lösung ab und bleibt bei

$$\omega(F = F_c) \simeq 1.1 \omega_\epsilon \quad (3.30)$$

endlich. Dies ist die Manifestation eines echten Quanteneffekts, erkennbar daran, dass die Frequenzskala, auf der ω endlich bleibt, nicht mehr durch die klassische Skala ω_0 bestimmt ist, sondern in einer unüblichen Potenz von \hbar abhängt,

$$\omega \sim \omega_0 \left(\frac{4\hbar\omega_0}{F_c L} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.31)$$

also $\omega \sim \hbar^{1/3}$, wie bei der Einführung der kritischen Skalen schon angedeutet wurde. Allerdings ist der experimentelle Zugang zur erforderlichen Nähe der Instabilität $\epsilon \simeq \Delta\epsilon$ aufgrund der Kleinheit von $\Delta\epsilon$ stark erschwert.

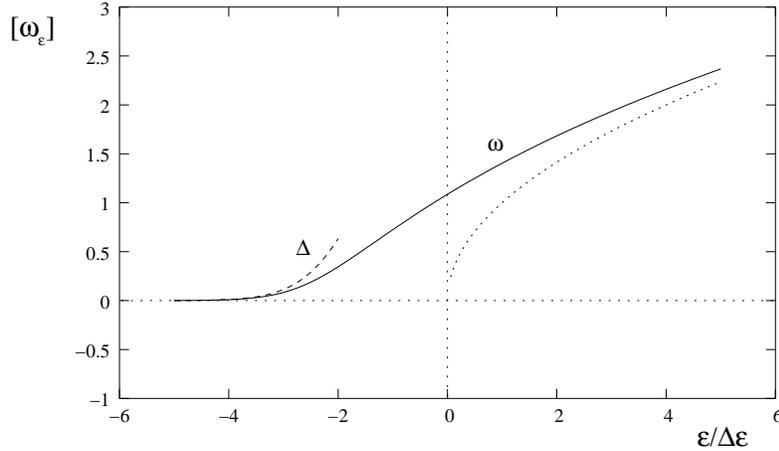


Abbildung 3.4: Numerisch exakte Anregungsfrequenz ω (durchgezogene Linie) nahe der Euler-Instabilität. Desweiteren eingezeichnet sind die klassische harmonische Frequenz ω_1 (gepunktete Linie) sowie Tunnelsplitting Δ (gestrichelte Linie) im Gültigkeitsbereich der WKB-Näherung.

In der symmetriebrochenen Phase können wir klassisch annehmen, dass die Anregungen aus kleinen Schwingungen um die neue Ruhe-Lage des Balkens, eines der beiden Minima des Doppelmuldenpotentials, bestehen. Berechnet man den Hamiltonian des zum Beispiel um das linke Minimum harmonisch genäherten Potentials in Abhängigkeit der Koordinate $\delta y = y - y_{\min,-}$, so ergibt sich

$$H_{\text{harm},<} = \xi_\varepsilon^{-1} \left(\sqrt{2} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial(\delta y)^2} + \frac{1}{2} (\delta y)^2 \right] - v_b \right). \quad (3.32)$$

Die klassische Anregungsfrequenz würde also, beginnend bei Null, mit über die kritische Kraft hinausgehender Kompression ansteigen wie

$$\omega_{\text{harm},<} = \omega_\varepsilon \sqrt{2 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|}. \quad (3.33)$$

Dies ist aber nur die klassische harmonische Lösung. Quantenmechanisch ist die niedrigste Anregungsfrequenz in einem solchen Doppelmuldenpotential durch die Tunnelfrequenz Δ gegeben, welche Tunnelprozesse zwischen den beiden Minima Rechnung trägt, und im nächsten Abschnitt genauer behandelt wird. Das Verhalten der numerischen Lösung lässt sich gut durch die Betrachtung Wellenfunktionen ψ_0, ψ_1, ψ_3 des Grundzustands und der ersten angeregten Zustände verstehen. In Abb. 3.5 ist ersichtlich, dass ψ_0 und ψ_1 wie die bindenden und antibindenden Orbitale in einem typischen Zweizustandssystem aussehen. Der Energieunterschied der entsprechenden Energieeigenwerte $\lambda_1 - \lambda_0$ rührt im wesentlichen von dem einen Knoten her, den ψ_1 als zum Ursprung symmetrische Lösung aufweist, und der energetisch ungünstig ist. Dieser Unterschied wird aber mit steigendem $|\varepsilon/\Delta\varepsilon|$ immer geringer und entspricht im wesentlichen dem Tunnelsplitting $\hbar\Delta$ (siehe unten), sodass ω exponentiell verschwindet und schon bei $\varepsilon/\Delta\varepsilon = -5$ für praktische Zwecke Null ist. Die

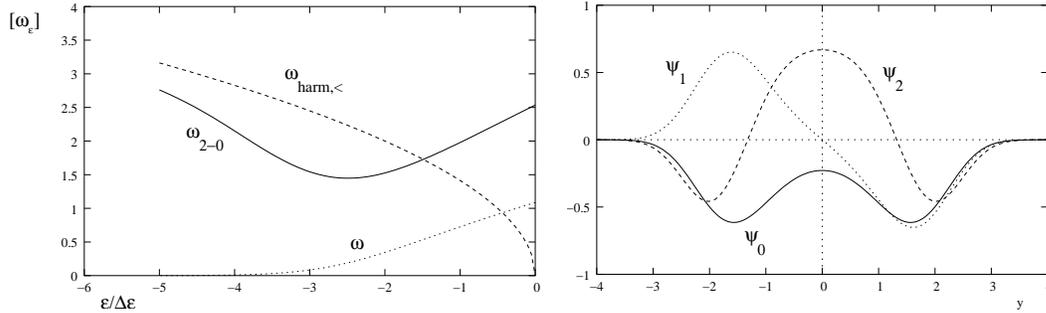


Abbildung 3.5: Links: Numerisch exakte zweite Anregungsfrequenz $\omega_{2,0}$ im Vergleich mit der klassischen Anregungsfrequenz in einem der Potentialminima.

Rechts: Die ersten drei Wellenfunktionen ψ_0, ψ_1, ψ_2 in der symmetriegebrochenen Phase für $\epsilon/\Delta\epsilon = -3$. Die zugehörigen Eigenenergien λ_1, λ_0 sind quasi entartet (vollständig für $\epsilon/\Delta\epsilon < -5$), während λ_2 deutlich größer ist und damit $\omega_{2,0} \gg \omega$ gilt.

nächste nicht-verschwindende Anregung wäre dann

$$\omega_{2,0} = \frac{1}{\hbar}(\lambda_2 - \lambda_0)\xi_\epsilon^{-1}, \quad (3.34)$$

deren Verlauf in Abb. 3.5 wiedergegeben ist. Man erkennt, dass diese wiederum ab $|\epsilon/\Delta\epsilon| > -3$ durch $\omega_{\text{harm},<}$ approximiert werden kann.

Insgesamt wird klar, dass man, um die kleinste Anregungsfrequenz (abgesehen von Dämpfung und Temperatur) tatsächlich zu beobachten, nicht nur ein mechanisches Finetuning des Parameters $\epsilon \simeq \mathcal{O}(\Delta\epsilon)$ erreichen muss, sondern selbst auf dieser sehr kleinen Skala noch in kontrollierter Art und Weise durch die Euler-Instabilität hindurchfahren können muss, da die entscheidende, vom klassischen Verhalten abweichende Physik nur im Bereich $-5 < \epsilon/\Delta\epsilon < 5$ stattfindet.

3.3 Makroskopische Quanten-Kohärenz (MQC)

Seit 1935 Schrödinger mit seinem berühmten Gedankenexperiment, einer Katze in einer Superposition der Zustände $|\text{tot}\rangle$ und $|\text{lebendig}\rangle$, auf die Probleme bei der Ausweitung quantenmechanischer Prinzipien auf die Makrophysik aufmerksam machte, dauerte es fast fünfzig Jahre, bis erste ernsthafte Vorschläge gemacht wurden, tatsächlich quantenmechanisches Verhalten von makroskopischen Größen, die selbst viele mikroskopische Freiheitsgrade beinhalten, nachzuweisen. Dabei ist die relativ kleine Kopplung des Systems an die Umgebung wichtig [53], da sonst die Quanten-Kohärenz in der zeitlichen Entwicklung zerstört wird. Verschiedene Systeme wurden inzwischen für eine möglichen Realisierung einer solchen MQC vorgeschlagen, darunter Supraleiter [15], Nanomagnetten [4] oder Ionen in optischen Fallen [59]. Vor drei Jahren kam schließlich der Durchbruch mit dem experimentellen indirekten Nachweis einer Superposition aus im Uhrzeigersinn und im Gegen-Uhrzeigersinn fließenden Strömen in einem “superconducting quantum interference

device" (SQUID) [82, 25]. Dies wird später noch etwas genauer beschrieben, aber man erkennt eine mögliche Analogie zur Situation eines Nanobalkens jenseits, aber noch sehr nahe der Euler-Instabilität: Ist es möglich, einen Nachweis einer Superposition aus "zur linken Seite gebogener Balken" und "zur rechten Seite gebogener Balken" zu erbringen? Wir werden dazu zunächst das gekoppelte Zweizustandssystem allgemein betrachten und auf den Nanobalken anwenden und dann nochmal kurz auf den erfolgreichen MQC Nachweis in SQUIDs eingehen.

3.3.1 Quantenmechanisches Zweizustandssystem

Wir betrachten allgemein ein System mit zwei möglichen, im Blick auf unser Problem mit $|L\rangle$, $|R\rangle$ bezeichneten Zuständen, die als Eigenzustände der Paulimatrix σ_z

$$\begin{aligned}\sigma_z |L\rangle &= |L\rangle \\ \sigma_z |R\rangle &= |R\rangle\end{aligned}\tag{3.35}$$

eine Basis unseres Zweizustandssystems bilden. Operatoren in diesem Raum können grundsätzlich als Linearkombinationen aus $\{\mathbf{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$, der Eins und den drei Paulimatrizen, dargestellt werden. Betrachtet man das System als vollkommen entkoppelt (unendlich hohe Potentialbarriere zwischen den beiden Minima), dann sind $|L\rangle$, $|R\rangle$ die Eigenzustände des Hamiltonoperators eines ungekoppelten Zweiniveausystems

$$\begin{aligned}H_{2-\text{lvl}}^0 |L\rangle &= E_L |L\rangle, \\ H_{2-\text{lvl}}^0 |R\rangle &= E_R |R\rangle.\end{aligned}\tag{3.36}$$

In unserem Fall sind die Energien E_L , E_R durch die Tiefe der Potentialminima bestimmt, die noch durch die quantenmechanische Nullpunkts-Energie nach oben verschoben werden. Dies ist aber weniger entscheidend, da der absolute Energie-Nullpunkt frei wählbar ist; es kommt vielmehr auf den Energieunterschied

$$\delta E = E_L - E_R\tag{3.37}$$

an. Dieser ist im Fall des vollkommen symmetrischen Potentials Gl. (3.18) natürlich Null. Allerdings wird in jedem realen System eine zufällige Asymmetrie im Potential vorhanden sein (im Weiteren werden wir noch den Fall diskutieren, dass δE gezielt durch Anlegen einer geeigneten Gate-Spannung kontrolliert wird). Diese sei klein gegenüber der Anregungsenergie der nächsthöheren Zustände, es muss also

$$|\delta E| \ll \hbar\omega_{2,0}\tag{3.38}$$

gelten, sonst bricht die Zwei-Niveau Näherung zusammen. Unter diesen Voraussetzungen können wir den symmetrischen Teil aus $H_{2-\text{lvl}}^0$ abspalten und in Matrizen-Schreibweise schreiben

$$H_{2-\text{lvl}}^0 = \frac{1}{2}(E_L + E_R)\mathbf{1} + \frac{\delta E}{2}\sigma_z \longrightarrow \frac{\delta E}{2}\sigma_z.\tag{3.39}$$

Im gekoppelten System sind Übergänge zwischen $|L\rangle$ und $|R\rangle$ möglich, der volle Hamiltonoperator enthält also Nichtdiagonalelemente, die durch die Tunnelfrequenz Δ bzw. Tunnelsplitting $\hbar\Delta$ bestimmt sind, und lautet in Standardform

$$H_{2-\text{lvl}} = \frac{\delta E}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_x = \begin{pmatrix} \delta E/2 & -\hbar\Delta/2 \\ -\hbar\Delta/2 & -\delta E/2 \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Die Lösungen dieses Zweizustandssystems sind durch die Linearkombinationen

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}|L\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|R\rangle, & E_0 &= -\frac{1}{2}\sqrt{(\delta E)^2 + (\hbar\Delta)^2}, \\ |1\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|L\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|R\rangle, & E_1 &= +\frac{1}{2}\sqrt{(\delta E)^2 + (\hbar\Delta)^2} \end{aligned} \quad (3.41)$$

gegeben, wobei der Winkel θ durch

$$\tan\theta = \frac{\hbar\Delta}{\delta E} \quad (3.42)$$

definiert ist. Die Anregungsfrequenz des Systems ist durch die Energiedifferenz der Zustände bestimmt,

$$\omega(\Delta, \delta E) = \frac{1}{\hbar}(E_1 - E_0) = \sqrt{(\delta E/\hbar)^2 + \Delta^2}, \quad (3.43)$$

was zum bekannten Bild des “avoided-level crossings” führt; die Energieniveaus stoßen einander ab anstatt zu kreuzen, wie es ohne Kopplung der Fall wäre (siehe Abb. 3.6). Variiert man bei festem Δ die Energiedifferenz δE , so entspricht zunächst für $\Delta \ll \delta E$

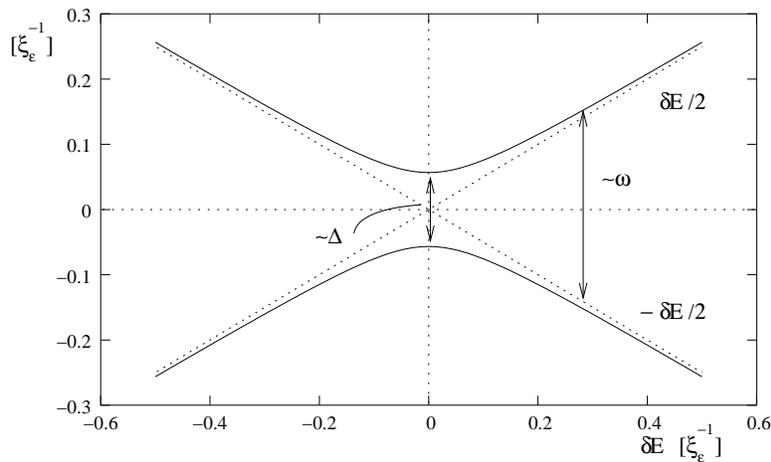


Abbildung 3.6: “Avoided-level crossing” für den Parameterwert $\varepsilon/\Delta\varepsilon = -3$.

der obere Zweig der höheren Energie des Zustandes $|L\rangle$ und der untere der niedrigeren des Zustandes $|R\rangle$. Geht nun δE gegen Null, mischen die Zustände vollständig, aber die

Anregungsenergie $E_1 - E_0$ bleibt endlich, sodass in der Situation bei $\delta E = 0$,

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle + |R\rangle), \\ |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|L\rangle - |R\rangle), \end{aligned} \quad (3.44)$$

die Anregungsfrequenz gleich der Tunnelfrequenz ist,

$$\omega = \Delta. \quad (3.45)$$

Die Energieniveaus bleiben also aufgespalten (daher auch ‘‘Tunnelsplitting’’ $\hbar\Delta$) und kreuzen sich nicht. Für negative δE ist dann die Rolle von $|L\rangle$ und $|R\rangle$ vertauscht. In einer dynamischen Beschreibung des Zweizustandssystems bei $\delta E = 0$ oszillieren die Wahrscheinlichkeiten, das System im Zustand $|L\rangle$ bzw. $|R\rangle$ zu finden, zwischen Null und Eins hin und her. Dies sind die bekannten Rabi-Oszillationen, und ihre Frequenz ist durch Δ bestimmt. Da jeder Oszillation zwischen den Zuständen in unserem Bild das Durch-Tunneln der Potentialbarriere entspricht, kommt der Name ‘‘Tunnelfrequenz’’ für Δ .

3.3.2 Berechnung des Tunnelsplittings Δ

Wir betrachten für die folgende Beschreibung ein Doppelmuldenpotential vom Typ Gl. (3.18) (siehe Abb. 3.1), das allerdings aus Gründen der einfacheren Darstellung um die Barrierenhöhe nach oben verschoben sein soll, sodass $v(y_{\min}) = 0$ gilt. Desweiteren benutzen wir dimensionsbehaftete Variablen $q = \bar{l}y$, $q_0 = \bar{l}y_{\min}$, $V_b = \xi_\varepsilon^{-1}v_b$ und setzen der Einfachheit halber $m_{\text{eff}} = m$. Damit lässt sich das Doppelmuldenpotential in der einfachen Form

$$V(q) = V_b(q^2 - q_0^2)^2/q_0^4 \quad (3.46)$$

schreiben. Desweiteren bezeichne q' den Wert, an dem $V(\pm q') = \hbar\omega_0/2$ gilt, d.h. $\pm q'$ entsprechen in der WKB-Näherung den klassischen Umkehrpunkte für ein Teilchen das sich im invertierten Potential $-V(q)$ bewegt. Die harmonischer Anregungsfrequenz um eines der Minima von $V(q)$, ω_0 , hatten wir zuvor schon in Gl. (3.33) berechnet ($\omega_{<, \text{harm}}$), in obiger dimensionsbehafteter Darstellung gilt

$$\omega_0 = \left(\frac{8V_b}{mq_0^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.47)$$

Im Folgenden soll die WKB-Formel für das Tunnelsplitting für derartige Potentiale vorgestellt werden. Desweiteren vergleichen wir mehrere Formeln aus unterschiedlichen Herleitungen und wählen eine günstige Darstellung, die ohne elliptische Integrale auskommt.

WKB-Formel

Ausgangs-Idee der WKB-Näherung ist es, die Schrödingergleichung eines Teilchens, das sich z.B. am rechten Minimum mit Energie $\hbar\omega_0/2$ im klassisch verbotenen Bereich befindet,

durch den Ansatz

$$\psi_0(q) = \frac{C}{\sqrt{m|p(q)|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^q |p(\bar{q})| d\bar{q} \right] \quad (3.48)$$

zu lösen, in ausreichender Entfernung der klassischen Umkehrpunkte, wo

$$p(q) = (2m(V(q) - \hbar\omega_0/2))^{1/2} \quad (3.49)$$

klein wird. Nach [48] ist das Tunnelsplitting dann durch die Herring Formel

$$\hbar\Delta = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0) \simeq 2\hbar C^2 \quad (3.50)$$

gegeben. In ihrer Herleitung wird im wesentlichen die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf der z.B. rechten Seite für einerseits das Ergebnis aus der Dynamik des Zweizustandssystems und andererseits dem allgemeinen Ausdruck aus der Kontinuitätsgleichung, miteinander verglichen. Die Konstante C wird nun durch Vergleich von Gl. (3.48) mit der Grundzustands-Wellenfunktion im rechten Minimum bestimmt, sodass sich als Endergebnis

$$\hbar\Delta = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{e\pi}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_{-q'}^{q'} |p(q)| dq \right] \quad (3.51)$$

ergibt. Diese Form ist zwar vollkommen korrekt, für praktische Zwecke aber aufgrund des komplizierten Integrals im Exponenten jedoch eher ungeeignet. Allerdings kann Gl. (3.51) geeignet so umgeschrieben werden [28], dass das Ergebnis unter Einbeziehung des Wirkungsintegrals

$$S_0 = \int_{-q_0}^{q_0} \sqrt{2mV(q)} dq \quad (3.52)$$

ausgedrückt werden kann. Das Ergebnis lautet dann:

$$\hbar\Delta = 2\hbar\omega_0 \left(\frac{m\omega_0 q_0^2}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \exp[B] \exp \left[-\frac{S_0}{\hbar} \right], \quad (3.53)$$

wobei ein zweites nur in einfacher Weise vom Potential abhängiges Integral

$$B = \int_0^{q_0} \left[\frac{m\omega_0}{\sqrt{2mV(q)}} - \frac{1}{q_0 - q} \right] dq \quad (3.54)$$

zu berechnen ist. Jetzt wollen wir noch den Zusammenhang dieser Ausdrücke mit dem aus der Instantonmethode [18] gewonnenen Ergebnis (siehe auch Kapitel 4) betrachten. Ein Instanton ist die Lösung $q_{\text{cl}}(\tau)$ der klassischen Bewegungsgleichung im umgekehrten Potential

$$m \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} q_{\text{cl}}(\tau) - V'(q_{\text{cl}}) = 0 \quad (3.55)$$

mit Randbedingungen $q_{\text{cl}}(\pm\infty) = \pm q_0$ und $q_{\text{cl}}(0) = 0$. Man kann nun für Potentiale wie das unsere zeigen sich die Geschwindigkeit des Instantons asymptotisch für $\tau \rightarrow \pm\infty$ wie $\alpha \cdot \exp[\mp\omega_0\tau]$ abfällt, wobei man α zu

$$\alpha = q_0\omega_0 \exp[B] \quad (3.56)$$

umformen kann. Der Ausdruck für das Tunnelsplitting in dieser Methode lautet

$$\hbar\Delta = 2\hbar R \left(-\frac{S_0}{2\pi\hbar} \right) \exp \left[-\frac{S_0}{\hbar} \right]. \quad (3.57)$$

Dabei ist R durch die Wurzel aus dem Quotienten zweier Funktionaldeterminanten gegeben:

$$R = \left[\frac{\det(-\partial_\tau^2 + \omega_0^2)}{\det'(-\partial_\tau^2 + m^{-1}V''(q_{\text{cl}}(\tau)))} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.58)$$

wobei im Nenner der Null-Eigenwert des Differentialoperators ausgeschlossen wird. Also hat R die Dimension einer Frequenz und muss für ausreichend glatte Potentiale auch von der Größenordnung der einzig vorkommenden Frequenzskala ω_0 sein. Nach [18] gilt

$$R = \sqrt{\frac{2m\omega_0}{S_0}} \alpha, \quad (3.59)$$

womit unter Zunahme von Gl. (3.56) die Äquivalenz der Darstellungen Gl. (3.53) und Gl. (3.57) gezeigt ist.

Δ für Nanobalken

Mit der obigen Vorarbeit kann Δ für unseren Fall sofort berechnet werden. Für das Wirkungsintegral Gl. (3.52) ergibt sich

$$S_0 = \int_{-q_0}^{q_0} \sqrt{2mV_b} \left(1 - \frac{q^2}{q_0^2} \right) dq = \frac{16}{3} \frac{V_b}{\omega_0}, \quad (3.60)$$

sodass man nach Einsetzen der Ausdrücke für V_b aus Gl. (3.20) und ω_0 aus Gl. (3.33) den dimensionslosen Ausdruck

$$\frac{S_0}{\hbar} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{3}{2}} \quad (3.61)$$

erhält. Das mechanische Finetuning ε muss sich also in jedem Fall auf der Skala $\Delta\varepsilon$ bewegen, da Δ sonst schnell exponentiell unterdrückt wird. Andererseits hatten wir gesehen, dass für den Anwendungsbereich der WKB-Formeln die Bedingung gelten muss, dass die quantenmechanische Nullpunkts-Energie in einem der harmonisch genäherten Potentiale um ein Minimum auch noch in dieses "hineinpassen muss", das heißt sie muss natürlich kleiner als die Barrieren-Höhe sein. Dies schränkt den Parameter $|\varepsilon/\Delta\varepsilon|$ noch weiter ein:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_0 < V_b \iff \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} < -2. \quad (3.62)$$

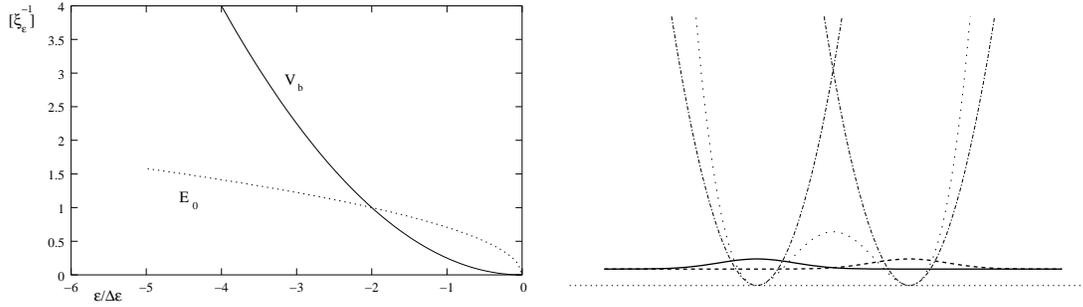


Abbildung 3.7: Links ist der Gültigkeitsbereich des WKB-Ansatzes in der symmetriegebrochenen Phase, $E_0 \leq V_b$, graphisch dargestellt.

Rechts sind im symmetriegebrochenen Fall die harmonischen Potentiale (Strich-Punkt-Linie) in die Potentialminima des echten Potentials (gepunktete Linie) eingebettet, welche im Tieftemperaturfall ein gekoppeltes Zweizustandssystem bilden. Außerdem sind noch die entsprechenden Grundzustands-Wellenfunktionen (durchgezogene bzw. gestrichelte Linie) auf Höhe der Grundzustands-Energie eingezeichnet.

Die Skala $\Delta\varepsilon$ ist also selbst so klein, dass ein makroskopischer Quanten-Balken auf ihr die Euler-Instabilität noch nicht richtig bemerkt. Die Berechnung des Integrals B ergibt

$$\begin{aligned}
 B &= \int_0^{q_0} \left[\frac{m\omega_0}{\sqrt{2mV(q)}} - \frac{1}{q_0 - q} \right] dq \\
 &= \int_0^{q_0} \left[\frac{m\omega_0 q_0}{\sqrt{2mV_b} q_0^2 - q^2} - \frac{1}{q_0 - q} \right] dq \\
 &= \int_0^{q_0} \left[\frac{2q_0}{q_0^2 - q^2} - \frac{1}{q_0 - q} \right] dq = \ln 2.
 \end{aligned} \tag{3.63}$$

Unter Verwendung von $m\omega_0 q_0^2 = 3/2 \cdot S_0$ erhalten wir damit für die Tunnelfrequenz [83]

$$\Delta = \hbar\omega_0 4\sqrt{3} \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{S_0}{\hbar} \right] \tag{3.64}$$

oder in unseren Einheiten

$$\Delta = \omega_\varepsilon \frac{8}{(2\pi^2)^{1/4}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{5}{4}} \exp \left[-\frac{2\sqrt{2}}{3} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{3}{2}} \right]. \tag{3.65}$$

Für unseren 100 nm langen SWNT ist bei einer Finetuning von $\varepsilon/\Delta\varepsilon = -3$ nur noch ein Wert von $\Delta \simeq 2\pi \cdot 1 \text{ MHz}$ zu erwarten. Die MQC sollte deshalb auf jeden Fall über eine Beobachtung des “avoided-level crossing” nachgewiesen werden, wozu es ausreicht, ein Abweichen von dem linearen Verhalten der Anregungsfrequenz zu sehen (Abb. 3.6). Dazu müsste in einer geeigneten Geometrie eine Gate-Spannung angelegt werden, die es erlaubt, δE gezielt zu variieren.

3.3.3 Aufhebung der Entartung durch kapazitive Kopplung

Man kann die Entartung der Energieminima wird durch einen zusätzlichen linearen Term im Potential $v(y)$ aufheben, der mittels Anlegen einer Spannung U über ein längs zum Balken verlaufendes Gate realisiert wird. Modelliert man das Gate als unendlich ausgedehnte Ebene im Abstand a vom Balken (SWNT mit Radius r) mit $r \ll a$ so ergibt sich eine Gesamtkapazität der Anordnung

$$C = \int_0^L c[\phi(s)] ds \quad (3.66)$$

mit der lokalen Kapazität

$$c[\phi(s)] = \frac{\epsilon_0}{2 \ln \frac{2(a+\phi(s))}{r}} \simeq \text{const} - \frac{\epsilon_0}{2a \ln^2 \frac{2a}{r}} \phi(s); \quad (3.67)$$

dabei ist $\epsilon_0 = 8.854 \text{ Fm}^{-1}$ die elektrische Feldkonstante. In der Näherung $\phi(s) = \mathcal{A}_1 \sin^2(\pi s/L)$ ergibt sich über $W = \frac{1}{2}CU^2$ ein zusätzlicher, von \mathcal{A}_1 abhängiger Energieterm

$$\delta W(\mathcal{A}_1) = -\frac{\epsilon_0 L}{4a \ln^2 \frac{2a}{r}} U^2 \mathcal{A}_1. \quad (3.68)$$

Wir gehen wieder zu Längen- und Energieskalen im kritischen Bereich, $l_\epsilon, \xi_\epsilon^{-1}$, über und erhalten eine Verschiebung im Potential

$$v_g(y) = -\frac{1}{2} \left| \frac{\epsilon}{\Delta\epsilon} \right| y^2 + \frac{1}{4} y^4 - g(U) \cdot y \quad (3.69)$$

mit dem linearen Koeffizienten

$$g(U) = \frac{\epsilon_0}{4} \frac{L}{a \ln^2 \frac{2a}{r}} \frac{l_\epsilon}{\xi_\epsilon^{-1}} U^2. \quad (3.70)$$

Erhöht man die Gate-Spannung U , so wird $|L\rangle$ metastabil, bis beim Erreichen von $g(U_c) = g_c$ mit

$$g_c = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left| \frac{\epsilon}{\Delta\epsilon} \right|^{3/2} \quad (3.71)$$

die Barriere verschwindet und $|L\rangle$ formal instabil wird (Natürlich wird in einem MQC-Experiment die Asymmetrie nie so groß werden, dass g_c erreicht wird, da dort die ganze Zwei-Niveau Näherung fragwürdig ist - an dieser Stelle wird g_c lediglich als Parameter zur Charakterisierung des Potentials gebraucht). Die entsprechend erforderliche Gate-Spannung liegt für unseren SWNT im Bereich $U_c \simeq 70 \text{ mV}$, wenn man für den Abstand des Gates $a = 50 \text{ nm}$ wählt und für $\epsilon/\Delta\epsilon = -3$ annimmt.

Die neuen Positionen der Extremwerte $v'_g = 0$ ergeben sich durch Lösung der kubischen Gleichung

$$y^3 - \left| \frac{\epsilon}{\Delta\epsilon} \right| y - g = 0 \quad (3.72)$$

zu

$$\begin{aligned}
 -y_{\min} &\rightarrow y_L = \frac{2}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{3} + \frac{2\pi}{3}\right), \\
 0 &\rightarrow y_b = \frac{2}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{3} + \frac{4\pi}{3}\right), \\
 +y_{\min} &\rightarrow y_R = \frac{2}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right),
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

wobei

$$\theta = \arccos\left(\frac{g}{g_c}\right) \tag{3.74}$$

im Bereich $[\pi/2, 0]$ liegt, wenn g von Null auf g_c erhöht wird. In Kapitel 4 betrachten wir den Fall $g \rightarrow g_c$, um ein echt metastabiles Potential zu schaffen; hier soll lediglich eine kleine Asymmetrie

$$\left| \frac{g}{g_c} \right| \ll 1 \tag{3.75}$$

betrachtet werden, die es erlaubt, das Zweizustandssystem in einem kleinen Bereich um die symmetrische Situation $g = 0$ zu untersuchen. In diesem Limes gilt $\theta = \pi/2 - g/g_c$, die beiden Energieminima verschieben sich zu

$$\begin{aligned}
 y_L &= -y_{\min} \left(1 - \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{g}{g_c}\right) \\
 y_R &= y_{\min} \left(1 + \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{g}{g_c}\right)
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

und man erhält in führender Ordnung einen linearen Zusammenhang zwischen dem kleinen Parameter g/g_c und der Energiedifferenz δE unseres Zweizustandssystems

$$\frac{\delta E}{\xi_\varepsilon^{-1}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^2 \frac{g}{g_c}. \tag{3.77}$$

In Abb. 3.6 war $\varepsilon/\Delta\varepsilon = -3$, die dort abgebildete Kurve entspricht also einem Intervall $g/g_c \in [-0.06; 0.06]$ entsprechend unserer Voraussetzung. Für Δ kann hier noch der Wert der vollkommen symmetrischen Situation verwendet werden, da Korrekturen erst in höherer Ordnung von g/g_c wichtig werden.

3.3.4 Einfluss von Dämpfung

An dieser Stelle wollen wir kurz darauf eingehen, wie Dämpfungseffekte die Realisierbarkeit von MQC beeinflussen werden. Die Dynamik des dissipativen Zweizustandssystems ist in aller Ausführlichkeit in [53] beschrieben. Wir beschränken uns auf den Ohmschen Fall und gehen davon aus, dass die Dämpfung des Nanobalkens über seinen Qualitätsfaktor Q als

phänomenologische Größe eingeht. Wenn in der klassischen Bewegungsgleichung noch ein Dämpfungsterm eingeführt wird,

$$m_{\text{eff}}\ddot{\mathcal{A}}_1 + \eta\dot{\mathcal{A}}_1 + \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}_1}V(\mathcal{A}_1) = 0, \quad (3.78)$$

so hängt Q über

$$\eta = \frac{\omega_1}{Q}m_{\text{eff}} \quad (3.79)$$

mit η zusammen. Für den Fall ohne Kompression $\omega_1 \simeq \omega_0$ gilt also

$$Q = \frac{\omega_0}{\eta}m_{\text{eff}}. \quad (3.80)$$

Nach [53] ist nun die entscheidende Größe, die den Einfluss der Dämpfung im Zweizustandssystem mit Ohmscher Dissipation bestimmt, der Parameter

$$\alpha = \frac{\eta q_0^2}{2\pi\hbar}, \quad (3.81)$$

wobei q_0 der Abstand der Minima im Potential Abb. 3.1 ist, in unserem Fall also

$$q_0 = (y_{\text{min},+} - y_{\text{min},-}) \cdot l_\varepsilon = 2 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} l_\varepsilon. \quad (3.82)$$

Im entarteten Fall $\delta E = 0$ betrachtet man nun den zeitlichen Verlauf von $P(t) = \langle \sigma_z(t) \rangle$. Dabei stellt sich heraus, dass man für $\alpha > 1$ Lokalisierung in einem der Zustände $|L\rangle, |R\rangle$ findet, d.h. eine beliebig kleine Asymmetrie führt bei $T = 0$ zu einem symmetriebrochenen Grundzustand $|L\rangle$ oder $|R\rangle$ (statt zu deren Linearkombination), die Dämpfung zerstört also die Kohärenz des Systems. Um die Kohärenz aufrechtzuerhalten, muss die Funktion $P(t)$ zumindest gedämpfte Oszillationen zeigen, wofür ein α -Wert von

$$\alpha < \frac{1}{2} \quad (3.83)$$

erforderlich ist. Diese Bedingung impliziert, dass für das freie System mindestens einen Q -Faktor von

$$\begin{aligned} Q &> \frac{m_{\text{eff}}\omega_0 q_0^2}{\pi\hbar} \\ &= \frac{m_{\text{eff}}\omega_\varepsilon}{\pi\hbar\sqrt{\Delta\varepsilon}} \cdot 4 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right| \frac{\hbar}{m_{\text{eff}}\omega_\varepsilon} \\ &= \frac{4}{\pi} \frac{|\varepsilon|}{(\Delta\varepsilon)^{3/2}} \end{aligned} \quad (3.84)$$

notwendig ist. Im interessanten Bereich von $|\varepsilon| \simeq \Delta\varepsilon$ braucht man also bei $\Delta\varepsilon \simeq 3 \cdot 10^{-5}$ einen Qualitätsfaktor von $Q > 220$ für den freien SWNT. Da bereits ein Si-Balkenresonator im GHz-Bereich "eher kleine" Werte von $Q = 500$ erreicht [44], kann man davon ausgehen, dass SWNTs die verlangte Güte erreichen sollten.

Korrektur zur Nullpunkts-Fluktuation in der symmetriegebrochenen Phase

In der symmetriegebrochenen Phase hatten wir für σ^2 lediglich den klassisch erwarteten Wert y_{\min}^2 angegeben. Berücksichtigt man im Zweizustandssystem noch Schwankungen um die klassischen Minima selbst, so ist in einem der Minima in harmonischer Näherung nach Gl. (3.32)

$$\begin{aligned}\langle L, R | y^2 | L, R \rangle &= y_{\min}^2 + \langle (\delta y)^2 \rangle \\ &= \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right| + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{-\frac{1}{2}};\end{aligned}\quad (3.85)$$

also ergibt sich im Grundzustand des Zweizustandssystems, wenn man im Orts-Raum $\langle y | L, R \rangle$ die Grundzustands-Wellenfunktion des harmonischen Oszillators im jeweiligen Minimum verwendet,

$$\begin{aligned}\langle 0 | y^2 | 0 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle L | y^2 | L \rangle + \langle R | y^2 | R \rangle + 2\langle L | y^2 | R \rangle) \\ &= y_{\min}^2 + \langle (\delta y)^2 \rangle + \int dy \ y^2 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp \{-y_{\min}^2 - y^2\} \\ &= y_{\min}^2 + (1 + \exp \{-y_{\min}^2\}) \langle (\delta y)^2 \rangle \\ &= \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right| + \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 + \exp \left\{ - \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right| \right\} \right) \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{-\frac{1}{2}};\end{aligned}\quad (3.86)$$

also nähert sich σ^2 in harmonischer Näherung dem linearen $|\varepsilon/\Delta\varepsilon|$ wie $1/\sqrt{|\varepsilon/\Delta\varepsilon|}$.

Analogie: Messung von MQC in SQUIDs

Diese Resultate kann man mit Messungen an SQUIDs vergleichen. Die verwendeten SQUIDs waren hier ein supraleitender Ring mit einer [25] bzw. drei [82] Josephson-Kopplungen. Das Anlegen von kleinen Magnetfeldern führt dort zu supraleitenden Strömen mit entsprechendem magnetischen Fluss Φ durch den Ring. Die Kombination von magnetischer Energie $\sim (\Phi - \Phi_{\text{ex}})^2$ und Josephson-Kopplungsenergie $\sim -\cos(2\pi\Phi/\Phi_0)$ (wobei Φ_{ex} der von außen angelegte Fluss und Φ_0 das magnetische Flussquant ist), erzeugt ein Doppelmuldenpotential ähnlich zu dem in Abb. 3.1, welches im Fall $\Phi_{\text{ex}} = \Phi_0/2$ symmetrisch ist. Die Minima dieses Potentials entsprechen den klassischen Zuständen aus Stromflüssen der Größenordnung μA mit dem ($|R\rangle$) und gegen ($|L\rangle$) den Uhrzeigersinn, die tatsächlich eine makroskopische Größe darstellen, da sie der Schwerpunktsbewegung von Millionen von Cooperpaaren entsprechen. Bei kompletter Überlagerung dieser Zustände hätte man dann einen makroskopisch kohärenten Zustand mit Strom-Erwartungswert Null realisiert (Zum Problem von Schrödingers Katze in SQUIDs siehe [54, 52]). Der Nachweis erfolgt, indem man den geeigneten Teils des Anregungsspektrums mittels Mikrowellen [82] bzw. Radiofrequenz- [25] Spektroskopie aus-misst. Dabei bleibt, während durch Variation von Φ_{ex} das Potential durch die symmetrische Lage geschoben wird, die Anregungsfrequenz endlich (Abb. 3.8), man beobachtet also die oben diskutierte Abstoßung der Energieniveaus.

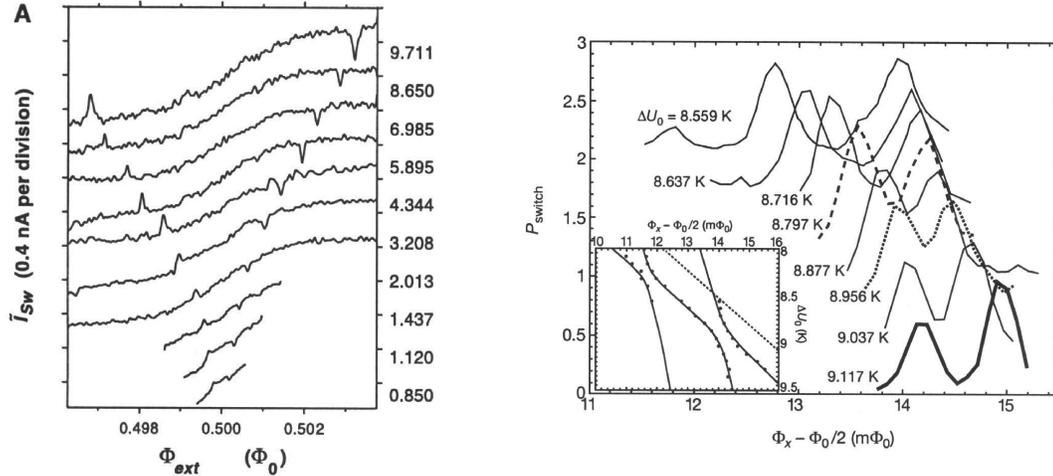


Abbildung 3.8: Links: Messdaten aus [82]. Die für sinkende Mikrowellen-Frequenz zum Zentrum wandernden kleinen Spitzen und Senken zeigen Übergänge zum andersherum gerichteten Strom an. Der Abstand der Peakpositionen von $\Phi_0/2$ geht nicht linear mit der Mikrowellen-Frequenz gegen Null, sondern strebt einem endlichen Wert zu.

Rechts: Messdaten aus [25]. Hier werden von einem energetisch tiefer liegendem Zustand aus Übergänge zu den beiden Zuständen $|L\rangle \pm |R\rangle$ mittels Radio-Frequenzen angeregt, daher 2 Peaks pro Kurve. Die "level repulsion" ist dadurch gezeigt, dass die Peaks erst zusammen- und dann wieder auseinanderlaufen.

3.4 Nelsons Quantenmechanik

1966 ließ E. Nelson die Diskussion wiederaufleben, ob sich die Quantenmechanik nicht doch mit Mitteln der klassischen statistischen Physik erklären und beschreiben ließe [62]. Die zugrunde liegende physikalische Idee ist, dass ein Teilchen, das der Schrödingergleichung genügt, einem klassischen Teilchen entsprechen soll, welches einer "universellen" Brownschen Bewegung im Vakuum ausgesetzt ist. Ein Quanten-Prozess entspräche also einem Markovschen Diffusionsprozess. Tatsächlich ist die Idee verlockend und ergibt, wie die vereinfachte Herleitung unten zeigt, richtige Ergebnisse für die mittlere quadratische Auslenkung (zu gleichen Zeiten) unseres Problems bei $T = 0$. Dies scheint aber auch alles zu sein, was korrekt mit diesem Ansatz ermittelt werden kann, denn 1979 zeigten Grabert, Hänggi und Talkner, dass Quantenmechanik "wenig bis gar nichts" mit der Theorie stochastischer Prozesse zu tun hat [31]. Insbesondere werden Korrelationen zu verschiedenen Zeiten sofort falsch berechnet. Der Grund liegt darin, dass man für Nelsons komplette Beschreibung sowohl zeitlich "vorwärts" wie "rückwärts" gerichtete Markov-Prozesse benötigt, wobei der verwendete rückwärts-gerichtete tatsächlich kein echter Markov-Prozess ist. In weiterer Analyse ergibt sich dann noch, dass es nicht einmal einen Nicht-Markovschen Prozess gibt, der äquivalent zur Schrödingergleichung ist.

Nichtsdestotrotz wird im Folgenden gezeigt, wie sich ein Teilchen, das "Nelsons Quantenmechanik" gehorcht, in unserem Doppelmuldenpotential bewegen würde, da sich daraus in

Mittelung über viele solche Prozesse die korrekte Nullpunktsschwankung ergibt.

Ableitung einer Diffusionsgleichung aus der Schrödingergleichung

Bezeichnen wie vorher $\{\lambda_n, \psi_n\}$ den Satz Eigenwerte und normierter Eigenvektoren zum dimensionslosen Hamiltonian h ,

$$h\psi_n = \lambda_n\psi_n, \quad (3.87)$$

dann ist $\{\lambda_n - \lambda_0, \psi_n\}$ der Satz Eigenwerte und normierter Eigenvektoren zu

$$\bar{h} \equiv h - \lambda_0 \cdot 1 \quad (3.88)$$

und insbesondere gilt

$$\bar{h}\psi_0 = 0. \quad (3.89)$$

Im Folgenden lassen wir die Notation der Querstriche wieder sein und schreiben h (H) statt \bar{h} (\bar{H}). Die zeitabhängige Schrödingergleichung ist

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi. \quad (3.90)$$

Geht man nun zur Imaginärzeit über ($\tau = it$), und misst sie in geeigneten Einheiten $\tau \rightarrow \tau \cdot \omega_\varepsilon^{-1}$, dann lautet die dimensionslose (imaginär-) zeitabhängige Schrödingergleichung

$$-\partial_\tau\psi = h\psi. \quad (3.91)$$

Man substituiert schließlich in (3.91)

$$\psi(y, \tau) = P(y, \tau)\psi_0^{-1}(y), \quad (3.92)$$

(wobei ψ_0 der stationäre Grundzustand von \bar{h} (Gl. 3.89) ist). Bezeichnet man der Einfachheit halber die dimensionslose Zeit wieder mit t , so ergibt sich für P die Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t P &= -\psi_0 \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + v \right) \frac{P}{\psi_0} \\ &= \frac{1}{2}\nabla^2 P - \left(\frac{(\nabla\psi_0)(\nabla P)}{\psi_0} + \frac{(\nabla^2\psi_0)P}{\psi_0} - \frac{(\nabla\psi_0)^2 P}{\psi_0^2} \right) \\ &= -\nabla \left(\frac{\nabla\psi_0}{\psi_0} P \right) + \frac{1}{2}\nabla^2 P, \end{aligned} \quad (3.93)$$

wobei $\partial_t\psi_0 = 0$ und $v\psi_0 = \frac{1}{2}\nabla^2\psi_0$ verwendet wurde. P erfüllt also eine klassische Diffusionsgleichung vom Typ

$$\partial_t P = -\nabla \left(\frac{f}{\eta} P \right) + D\nabla^2 P \quad (3.94)$$

die die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Teilchens in Raum und Zeit beschreibt, welches sich in einem (dimensionslosen) Potential

$$u = -2 \ln \psi_0$$

aufgrund der Kraft $f = -\nabla u$ viskos mit einer dimensionslosen Viskosität $\eta = 2$ bewegt und dabei einer Brownschen Bewegung mit dimensionsloser Diffusionskonstante $D = \frac{1}{2}$ unterworfen ist [63]. Betrachtet man den physikalischen Diffusionsprozess, indem man eine Temperatur $\beta = 1/k_B T$ einführt und zu dimensionsbehafteten Größen auf normalen Skalen ($[x]=m, [t]=s$) zurückkehrt, so gelten die Zusammenhänge

$$\begin{aligned} F &= -\nabla U = \beta^{-1}(-\nabla u), \\ D &= \frac{1}{2}\omega_0 l_0^2, \\ \eta &= \frac{2}{\beta\omega_0 l_0^2}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Äquivalenz der Erwartungswerte $\langle y^n \rangle$

Für große Zeiten t geht P in die Gleichgewichtsverteilung über

$$P(y, t \rightarrow \infty) \rightarrow P_{\text{eq}}(y) \sim \exp\{-\beta U(y)\}, \quad (3.96)$$

und die Einstein-Relation

$$\frac{\eta D}{k_B T} = 1 \quad (3.97)$$

ist erfüllt. Tatsächlich gibt es in diesem Fall nur einen relevanten Parameter ($\omega_0 l_0^2$), die ‘‘Temperatur’’ unseres klassischen Vergleichssystems hat keinen echten Einfluss (nicht zu verwechseln mit der physikalischen Temperatur $T = 0$ des Quanten-Systems).

Mittelwerte der Form

$$\langle y^n(t) \rangle_{\text{rw}} = \int dy y^n P(y, t) \quad (3.98)$$

entsprechen also für große Zeiten den Erwartungswerten $\langle y^n \rangle_{\text{qm}}$ des quantenmechanischen Systems (3.17)

$$\langle y^n(t \rightarrow \infty) \rangle_{\text{rw}} = \int dy y^n P(y, t \rightarrow \infty) = \int dy y^n \psi_0^2 = \langle y^n \rangle_{\text{qm}} \quad (3.99)$$

und lassen sich durch eine Mittelung über viele Zufallspfade $y_{\text{rw}}(t)$ gewinnen. Diese sind Realisierungen des zugrunde liegenden Markov-Prozesses

$$dy = \frac{f(y)}{\eta} dt + dw(t). \quad (3.100)$$

Der erste Term ist der Drift-Term, der im vorliegenden Limes hoher Viskosität die zur Geschwindigkeit proportionale Reibungskraft beschreibt. Der zweite Term, die Brownsche Verschiebung, wird durch den Wiener-Prozess $w(t)$ beschrieben und ist charakterisiert durch unkorreliertes Rauschen mit Mittelwert Null und Autokorrelationsfunktion

$$\langle dw(t)dw(t') \rangle = 2Ddt\delta(t-t'). \quad (3.101)$$

Realisierung des Markov-Prozesses

Die einfachste Möglichkeit zur numerischen Erzeugung geeigneter Zufallswege $y_{\text{rw}}(t)$ ist das Eulerverfahren [35]. Wenn r_j eine Reihe von Zufallszahlen aus $[0, 1]$ bezeichnet, dann ist $y_{\text{rw}}(t)$ bei Schrittweite dt festgelegt durch

$$y_{j+1} = y_j + \frac{\nabla\psi_0}{\psi_0}(y_j)dt + \sqrt{12dt}(r_j - 0.5). \quad (3.102)$$

Zunächst wird ψ_0 numerisch durch Diagonalisieren von h bestimmt, wobei für den Laplace-

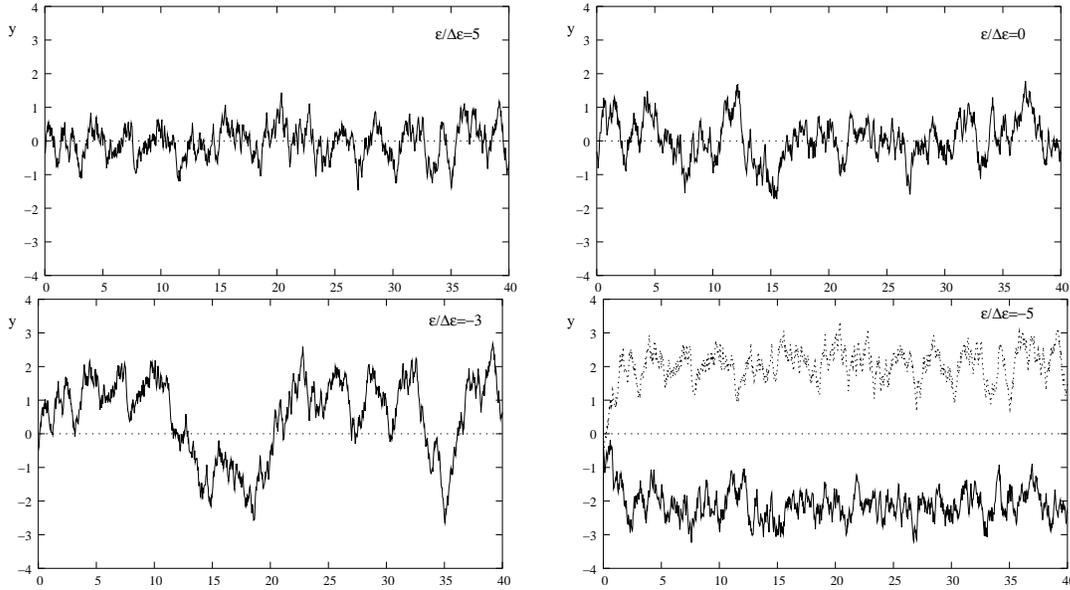


Abbildung 3.9: Randomwalk in Potential $-2 \ln \psi_0$. Es werden 1000 Schritte bei Schrittweite $dt = 0.04$ ausgeführt, für Parameter-Werte von $\epsilon/\Delta\epsilon = 5, 0, -3$. Für $\epsilon/\Delta\epsilon = -5$ sind zwei mögliche Wege in die jeweils unterschiedlichen Potentialminima gezeigt, zwischen denen Übergänge schon sehr rar werden.

Operator ∇^2 die diskrete Form $\frac{1}{\Delta n^2} (\psi(n+1) + \psi(n-1) - 2\psi(n))$ verwendet wird. Da der Gradient numerisch instabil ist, wird $\nabla\psi_0$ mittels zweimaliger Fast Fourier Transformation über die Kette

$$\psi_0(y) \rightarrow \psi_0(k) \rightarrow -ik\psi_0(k) \rightarrow \nabla\psi_0(y) \quad (3.103)$$

berechnet [67]. In Abbildung (3.9) sind einige Zufallswege nach (3.102) für verschiedene Parameter-Werte $\epsilon/\Delta\epsilon = 5, 0, -3, -5$ dargestellt. Dabei erkennt man im Fall $\epsilon/\Delta\epsilon = -3$ schon die doppelmuldenartige Struktur des Potentials, allerdings sind Übergänge zwischen den beiden Mulden noch recht wahrscheinlich.

Erwartungswerte der Form (3.98) werden nun durch Mittelung über $\mathcal{N} = 80000$ Zufallswege nach der Zeit $T = 40$ berechnet

$$\langle y^n(T) \rangle_{\text{rw}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} (y_{\text{rw}}^{(k)}(T))^n \quad (3.104)$$

(wobei mehrere Runs mit unterschiedlichen dt gemacht werden und dann nach $dt = 0$ extrapoliert wird). Aus Symmetriegründen ist natürlich $\langle y(T) \rangle_{\text{rw}} = 0$, während $\sigma_{\text{rw}}^2 = \langle y^2(T) \rangle_{\text{rw}}$ in Abb. 3.10 dargestellt ist. Dieselbe Methode wurde in [58] auf das Problem

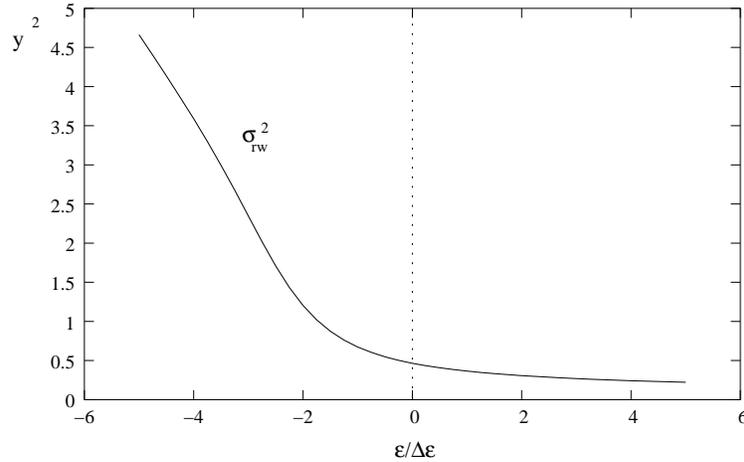


Abbildung 3.10: Mittlere quadratische Auslenkung $\sigma_{\text{rw}}^2 = \langle y^2 \rangle_{\text{rw}}$ als Funktion von $\varepsilon/\Delta\varepsilon$, berechnet nach Gl. (3.104).

der Untersuchung von Ordnungsparameter-Fluktuationen des eindimensionalen Ginzburg-Landau-Funktional angewandt. Tatsächlich entsprechen die auf diese Art berechneten Nullpunkts-Fluktuationen genau den quantenmechanisch berechneten in Abb. 3.2.

Kapitel 4

Makroskopisches Quantentunneln

Wie in Kapitel 3 gesehen, kann unser Balken unter longitudinalem Druck als effektives Einteilchen-Problem beschrieben werden. Jenseits der Euler-Instabilität bewegt sich das Teilchen in einem Doppelmuldenpotential, dessen Minima mit den makroskopisch unterscheidbaren Zuständen $|L\rangle, |R\rangle$ korreliert sind und in Form und Lage noch von seitlich angelegten Gate-Spannungen abhängen. Bei Entartung oder schwacher Aufhebung derselben konnten wir das System als Zweizustandssystem beschreiben. In diesem Kapitel geht es darum, die mittlere Zerfallsrate aus einem metastabilen Zustand $|L\rangle$ in den energetisch niedrigeren stabilen Zustand $|R\rangle$ zu berechnen. Dabei wird das entsprechend asymmetrische Potential erreicht, indem die Gate-Spannung so erhöht wird, dass die Barriere fast verschwindet und sich die Minima energetisch stark unterscheiden. Die entscheidend zu berechnende Größe ist nun die Zerfallsrate k , ($[k] = s^{-1}$), aus dem metastabilen Zustand, die im Einteilchen-Bild einer inversen Verweildauer oder Zerfallszeit entspricht. Diese Rate hängt natürlich von der Temperatur und von der Kopplung des Systems an die Umgebung ab: Man erwartet einen Übergang von reinem Quantentunneln bei $T = 0$ zu überwiegend thermischem Überwinden der Barriere bei höheren Temperaturen. Die Beobachtung eines solchen Übergangs $|L\rangle \rightarrow |R\rangle$ im quantenmechanisch dominierten Bereich oder der messbare Einfluss von quantenmechanischen Korrekturen im thermisch dominierten Regime wäre dann ein Nachweis eines weiteren Quanteneffekts in makroskopischen, rein mechanischen Systemen.

Im ersten Abschnitt wird nun zunächst ein genereller Überblick der Theorie von Quantenzerfallsraten aus metastabilen Zuständen bei endlichen Temperaturen unter Einfluss der Umgebung gegeben. Die Anwendung der Ergebnisse auf unser Modell-System folgt dann in Abschnitt zwei.

4.1 Theorie der Quantenzerfallsraten

Historisch gesehen wurde Quantentunneln erstmals 1927 von Friedrich Hund [37] beschrieben, der damit die Aufspaltung der Vibrationsspektren in pyramidalen Molekülen wie Ammoniak (NH_3) mit delokalisiertem Grundzustand erklärte. Der Effekt wurde in den

Folgejahren ausgiebig erforscht, um physikalische Phänomene zu modellieren, bei denen in irgendeiner Art eine Potentialbarriere ohne Leistung der entsprechenden klassischen Austrittsarbeit überwunden wird. Als bekanntester Effekt sei hier der radioaktive Zerfall von Atomkernen genannt. Quantenmechanische Tunnelraten

$$k \sim \exp[-\Gamma] \quad (4.1)$$

werden seit 1928 [26] durch den Gamow-Faktor $\Gamma = S_0/\hbar$ (siehe Gl. (3.53)) beschrieben. Theoretisch ist das Problem von Quantentunneln in dissipativen Systemen durch moderne Pfadintegralformulierungen der Quantenmechanik [24] und durch die Caldeira-Leggett-Darstellung eines dissipativen Systems mittels Kopplung an ein Reservoir harmonischer Oszillatoren [12] zu behandeln. Mit solchen Werkzeugen ausgestattet konnten Probleme dieser Art zum eigenen Forschungsfeld werden, der ‘‘Makroskopischen Quantenmechanik’’. Beste Realisierungen von sogenanntem makroskopischen Quantentunneln (MQT) sind Josephson-Kontakte mit kleiner Kapazität nahe am kritischen Strom (siehe [17] und Kapitel 3), mit welchen die unten vorgestellte Theorie in weiten Teilen bestätigt werden konnte.

Betrachten wir also den Zerfall eines metastabilen Zustandes eines Systems bei endlicher Temperatur, welches dissipativ an ein Wärmebad gekoppelt ist. Für den thermisch aktivierten Zerfall gilt im Hochtemperaturbereich das klassische Arrhenius-Gesetz

$$k \sim \exp[-\beta V_b]; \quad (4.2)$$

nun geht es um eine detailliertere, auf Funktionalintegralen basierte Bestimmung der Zerfallsraten, die abhängig von Art und Stärke der dissipativen Kopplung die Bereiche Quantentunneln und thermischen Zerfall sowie deren Übergang beschreiben. Die folgende Darstellung folgt dabei im Wesentlichen den Arbeiten von Grabert, Olschowski und Weiss [32, 83].

Formulierung des Problems

Das System sei ein Teilchen mit Masse m , das sich in einem Potential $V(q)$ bewegt, welches einen klassisch metastabilen Zustand besitzt, siehe Abb. 4.3. Metastabil heißt, dass die Barrieren-Höhe V_b groß gegenüber den anderen relevanten Energieskalen des Systems ist,

$$V_b \gg \hbar\omega_0, \quad V_b \gg k_B T, \quad (4.3)$$

wobei die Frequenz in der Mulde

$$\omega_0^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} V(0) \quad (4.4)$$

die niederenergetische ungedämpfte Dynamik nahe der Potentialmulde beschreibt. Eine weitere entscheidende Größe für die folgende Diskussion wird die Barrieren-Frequenz

$$\omega_b^2 = -\frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} V(q_b) \quad (4.5)$$

sein, welche die Breite der parabolischen Barrieren-spitze bestimmt. Wärmebad und Kopplung seien identisch wie in Kapitel 2 modelliert, nämlich als linear angekoppeltes Bad aus harmonischen Oszillatoren [12] derart, dass der Einfluss des Bades in der klassische Bewegungsgleichung

$$m\ddot{q} + m \int_0^\infty ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) + \frac{\partial}{\partial q} V = 0 \quad (4.6)$$

nur über den Dämpfungsterm $\gamma(t)$ Gl. (2.80) eingeht. Die schematische Vorgehensweise wird sein, die Zustandssumme Z_β des Teilchens durch Ausintegration der Badfreiheitsgrade zu bestimmen. Die Metastabilität des Systems führt, wie unten genauer gezeigt, zu einem imaginären Anteil der Zustandssumme und damit über

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\beta \quad (4.7)$$

zu einem imaginären Anteil der freien Energie des Systems. Dieser Anteil beschreibt nun nach Langer [50] die endliche Lebenszeit des Zustandes, analog zum imaginären Anteil der in der Quantenmechanik auftretenden Resonanzenergien, und man kann darüber die Zerfallsrate bei endlicher Temperatur T definieren:

$$k = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} F. \quad (4.8)$$

Bevor dieser Weg etwas detaillierter beschrieben wird, fügen wir kurz ein, was man durch klassische Betrachtungen zu erwarten hat.

Klassische Ratentheorie

Das Arrhenius-Gesetz Gl. (4.2) ist natürlich auf den thermischen Effekt zurückzuführen, dass der Anteil der kanonischen Anfangsverteilung mit einer Energie größer als die Barrieren-Höhe V_b exponentiell klein ist. Die Ratenformel ist dann durch den Wahrscheinlichkeitsstrom über die Barriere gegeben, wobei man davon ausgeht, dass das Teilchen, einmal über die Barriere hinaus, nicht zurückkehren wird. Damit ergibt sich aus der “transition state theory” als Vorfaktor die Frequenz des harmonischen um die Mulde entwickelten Potentials, $\omega_0/2\pi$, die auch als “attempt frequency” bezeichnet wird. Dieser Vorfaktor wird dämpfungsabhängig, wenn man den Einfluss von frequenzunabhängiger Dämpfung miteinbezieht. Dabei ist zunächst zu sagen, dass ein gewisses Maß an Kopplung benötigt wird, damit für das Teilchen in der Mulde thermisches Gleichgewicht gilt (bei sehr schwacher Dämpfung fällt der Vorfaktor proportional zu γ ab). Ist dies gewährleistet, gibt es eine Korrektur

$$\rho = \left[(1 + \alpha^2)^{\frac{1}{2}} - \alpha \right] \quad (4.9)$$

zum Vorfaktor des klassischen Arrhenius-Gesetzes, mit $\alpha = \gamma/2\omega_b$. Dies wurde bereits von Kramers [46] gefunden, als er das Problem mit Mitteln der stochastischen Dynamik untersuchte, wobei die Bewegungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens in diesem Fall durch die Klein-Kramers-Gleichung gegeben ist. Für sehr starke Dämpfung

fällt ρ also ebenfalls ab. Für unsere Zwecke ist der Vorfaktor der thermischen Rate von geringerer Bedeutung, und wir verweisen für Einzelheiten auf [83]. Außerdem nehmen wir später eine schwache bis moderate Dämpfung an und verwenden deshalb als thermische Zerfallsrate

$$k_{\text{cl}} = \rho \frac{\omega_0}{2\pi} \exp[-\beta V_b]. \quad (4.10)$$

Komplette quantale Beschreibung mittels Funktionalintegralen

Die Zustandssumme Z_β des Systems ist die Spur über den reduzierten Dichteoperator ρ_β und wird als Funktionalintegral in Imaginärzeit dargestellt,

$$Z_\beta = \int \mathcal{D}q \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S[q] \right], \quad (4.11)$$

wobei die Imaginärzeit-Darstellung von der Interpretation des Dichteoperators $\exp(-\beta H)$ als Zeitentwicklungsoperator $\exp(-iHt/\hbar)$ mit der imaginären Zeit $t = -i\hbar\beta$ herrührt. Summiert wird dabei über alle geschlossenen Pfade $q(0) \rightarrow q(\tau = \hbar\beta) = q(0)$. Die effektive Wirkung setzt sich zusammen aus der Euklidischen Wirkung des nicht-dissipativen Teilchens im Potential $V(q)$ und einem Influenzfunktionalanteil, der den Einfluss des Wärmebades beschreibt:

$$S[q] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q) \right) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') q(\tau) q(\tau'). \quad (4.12)$$

Dabei lässt sich der Influenzkern $k(\tau)$ aufgrund der Periodizität in $[0, \hbar\beta]$ als Fourierreihe schreiben

$$k(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_n K(\nu_n) \exp(i\nu_n \tau) \quad (4.13)$$

mit den Masubara-Frequenzen $\nu_n = 2\pi n/\hbar\beta$. Die Fourierkoeffizienten des Influenzkerns hängen direkt über die Laplacetransformierte

$$\hat{\gamma}(z) = \int_0^\infty dt \gamma(t) e^{-zt} \quad (4.14)$$

vom Dämpfungskern ab,

$$K(\nu_n) = m |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|). \quad (4.15)$$

Im Fall Ohmscher Dämpfung ist $\hat{\gamma}(z) = \gamma$.

Um das Funktionalintegral auszuwerten werden Pfade $q(\tau)$ gesucht, welche die effektive Wirkung Gl. (4.12) minimieren, also der Bewegungsgleichung

$$m\ddot{q} - \frac{\partial}{\partial q} V - \int_0^{\hbar\beta} d\tau' k(\tau - \tau') q(\tau') \quad (4.16)$$

genügen und periodisch in $[0, \hbar\beta]$ sind. Ohne Dämpfung wären dies gerade die klassischen Bahnen im umgekehrten Potential $-V(q)$. Man erkennt nun sofort, dass die zwei

stationären Bahnen $q(\tau) = 0$ und $q(\tau) = q_b$ Lösungen von Gl. (4.16) sind (auch mit Dämpfung). Darüberhinaus gibt es noch nicht-triviale “Instanton”-Lösungen, die das Tunneln beschreiben (siehe unten). Standardmäßig behandelt man entsprechende Beiträge zum Funktionalintegral, indem man periodische Pfade um die stationäre Lösung betrachtet,

$$q(\tau) = q_{\text{stat}} + \sum_n X_n \exp(i\nu_n \tau) \quad (4.17)$$

wobei dann die Summation über alle Pfade in ein Produktintegral über die Koeffizienten X_n zerfällt:

$$\int \mathcal{D}q \longrightarrow \prod_n \int dX_n. \quad (4.18)$$

Die verbleibenden Integrale sind Gaußscher Natur, da man für die Entwicklung Gl. (4.17) die Wirkung

$$-\frac{1}{\hbar} S[\{X_n\}] = -\beta V(q_{\text{stat}}) - \frac{1}{2} m\beta \sum_n \lambda_n^{(\text{stat})} X_n X_{-n} \quad (4.19)$$

erhält. Die $\{\lambda_n^{(\text{stat})}\}$ sind die Eigenwerte der entsprechenden Fluktuationsmode, welche für die Lösung um die labile Lage $q(\tau) = 0$ alle positiv sind:

$$\lambda_n^{(0)} = \omega_0^2 + \nu_n^2 + |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|), \quad (4.20)$$

sodass die Auswertung der entsprechenden Integrale einen regulären Beitrag $Z_\beta^{(0)}$ zur Zustandssumme liefert.

Dagegen spiegelt sich die ganze Physik, die in diesem Problem steckt, in der Analyse der Eigenwerte der Moden um die (stabile) Lage $q(\tau) = q_b$ wider,

$$\lambda_n^{(b)} = -\omega_b^2 + \nu_n^2 + |\nu_n| \hat{\gamma}(|\nu_n|). \quad (4.21)$$

Zum einen ist der nullte Eigenwert immer negativ, was zu einem zunächst divergenten Integral über die nullte Mode führt (Die höheren Moden können wie vorher direkt ausgewertet werden). Dies ist natürlich eine Konsequenz der Tatsache, dass hier ein metastabiles System untersucht wird. Um die Divergenz zu vermeiden, verschiebt man den Integrationsweg in die komplexe Ebene. $Z_\beta^{(b)}$ erhält dadurch einen imaginären Anteil (der Realteil ist wegen der exponentiellen Unterdrückung $\exp(-\beta V_b)$ gegenüber $Z_\beta^{(0)}$ zu vernachlässigen). Infolgedessen erhält auch die freie Energie nach Gl. (4.7) einen imaginären Anteil

$$\text{Im} F \simeq -\frac{\text{Im} Z_\beta^{(b)}}{\beta Z_\beta^{(0)}} \quad (4.22)$$

über den dann gemäß Gl. (4.8) die Zerfallsbreite definiert werden kann.

Crossover-Temperatur

Bis hierher wurden nur Fluktuationen um stationäre Bahnen betrachtet, es stellt sich nun die Frage, ob noch weitere, die Wirkung minimierende, nicht-stationäre Bahnen möglich sind. Tatsächlich werden mit sinkender Temperatur die Eigenwerte der höheren Moden abgesenkt, bis eine neue Instabilität erreicht wird, wenn der Eigenwert der ersten Mode verschwindet. Die entsprechende Temperatur definiert die Übergangs- oder “Crossover” Temperatur durch

$$\lambda_{\{1,-1\}}^{(b)}(T = T_{\text{cross}}) = 0. \quad (4.23)$$

Unterhalb von T_{cross} ist die Periode $\hbar\beta$ groß genug dass es periodische, nicht-stationäre Bahnen $q_B(\tau)$ gibt, welche die Wirkung minimieren. Diese schwingen quasi im umgekehrten Potential hin und her und werden deshalb als “bounce”-Lösungen bezeichnet (im Fall $T = 0$ sind diese Lösungen die Instantonen). Ihre Beiträge stellen Bewegungen im klassisch verbotenen Bereich dar, deren Wirkung kleiner ist als die der Lösung $q(\tau) = q_b$; sie dominieren mit sinkender Temperatur das Funktionalintegral immer stärker. T_{cross} ist also tatsächlich eine Übergangs-Temperatur zwischen quantenmechanisch dominiertem Tunnel-Regime und Bereich des klassischen, thermischen Entkommens. Im Fall Ohmscher Dämpfung ist sie durch

$$T_{\text{cross}} = \frac{\hbar\omega_b}{2\pi k_B} \cdot \rho \quad (4.24)$$

gegeben, was bei verschwindender Dämpfung genau der Temperatur entspricht, bei der der Exponent im Arrhenius-Gesetz gleich dem Gamow-Faktor Gl. (4.1) ist. Der Faktor ρ wird auch als Grote-Hynes Korrektur bezeichnet. Man sieht, dass T_{cross} mit stärkerer Dämpfung sinkt, das Quantentunneln wird also durch die Dämpfung unterdrückt.

Für $T > T_{\text{cross}}$ muss die Definition der Zerfallsrate Gl. (4.8) noch um einen Faktor T_{cross}/T modifiziert werden, da die “bounce”-Lösungen zur stationären Lösung q_b entarten. Die integrierten Fluktuationsmoden lassen sich dann bequem über die Funktionaldeterminante der Fluktuationen darstellen, und man erhält schließlich ein in zweifacher Hinsicht modifiziertes Arrhenius-Gesetz

$$k = \rho \times c_{\text{qm}} \times \frac{\omega_0}{2\pi} \exp[-\beta V_b], \quad (4.25)$$

in dem einerseits die Grote-Hynes Korrektur den dämpfungsabhängigen Effekt des “re-crossings” über die Barrieren-spitze beschreibt und mit dem Ergebnis aus der klassischen Ratentheorie übereinstimmt. Andererseits gibt es noch Quantenkorrekturen.

Quanten-Korrekturfaktor

Im Faktor

$$c_{\text{qm}} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^{(0)}}{\lambda_n^{(b)}}, \quad (4.26)$$

in dem die Funktionaldeterminanten enthalten sind, stecken quantenmechanische Korrekturen zur klassischen Zerfallsrate. Man erkennt sofort, dass c_{qm} in der Nähe der Übergangs-

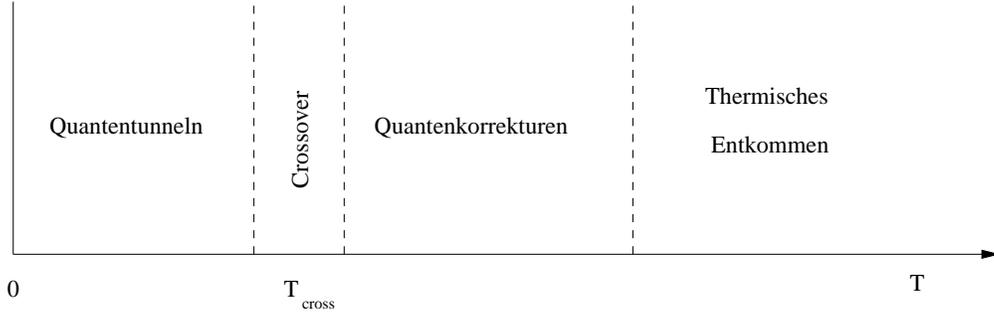


Abbildung 4.1: Schematisch skizzierter Zerfallsmechanismus in Abhängigkeit der Temperatur, nach [83].

Temperatur aufgrund der Nullstelle von $\lambda_1^{(b)}$ nicht ausreichend akkurat bestimmt ist. Tatsächlich reicht im Crossover-Bereich die harmonische Beschreibung des Potentials um q_b nicht aus, es müssen höhere Terme in der Entwicklung zugezogen werden, die dann über quartische Terme der Modenamplitude $X_{1,-1}$ das Funktionalintegral stabilisieren. In der entsprechend genaueren Behandlung wird nach einem kleinen Parameter $t = |T - T_{\text{cross}}|/T_{\text{cross}}$ entwickelt, für Ergebnisse und Skalenverhalten in der Crossover-Region sei auf die Referenzen [32, 83] verwiesen. Im Limes sehr hoher Temperaturen gilt $c_{\text{qm}} \rightarrow 1$, und man befindet sich im Bereich des rein klassischen, thermischen Entkommens. Zwischen diesem und dem Crossover-Bereich gibt es allerdings noch einen Bereich, in dem Quantenkorrekturen eine wichtige Rolle spielen, c_{qm} also einen signifikanten Beitrag liefert. Das führt zu einer Situation, die schematisch in Abb. 4.1 gezeigt ist. Physikalisch ist dies aus zweierlei Gründen klar: Einerseits führt die quantenmechanische Nullpunkts-Energie zu einer effektiv niedrigeren thermisch zu überwindenden Barriere, andererseits können thermisch angeregte Teilchen leichter durch eine in dieser Höhe dünnere Barriere tunneln. Der Quanten-Korrekturfaktor lässt sich im Hochtemperaturlimes entwickeln

$$\begin{aligned}
c_{\text{qm}} &= \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^{(0)}}{\lambda_n^{(b)}} \right\} \\
&\simeq \exp \left\{ \frac{\omega_0^2 + \omega_b^2}{(2\pi k_B T / \hbar)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \frac{1}{1 + \hbar \hat{\gamma}(\nu_n) / 2\pi n k_B T} \right\} \\
&= \exp \left\{ \frac{\hbar^2 (\omega_0^2 + \omega_b^2)}{24 (k_B T)^2} \left(1 - \frac{3\hbar}{\pi^3 k_B T} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hat{\gamma}(\nu_n)}{n^3} + \mathcal{O}(T^{-2}) \right) \right\}, \quad (4.27)
\end{aligned}$$

sodass sich in niedrigster Ordnung eine dämpfungsunabhängige Korrektur ergibt. In Abb. 4.2 ist das Verhalten von c_{qm} zu sehen. Es fällt auf, dass für eher schwache Dämpfung die dämpfungsunabhängige Näherung bis zur Ordnung T^{-2} vollkommen ausreicht, erst für mittlere bis hohe Dämpfungen zeigen sich Unterschiede, sodass eine Mitnahme des Terms der Ordnung T^{-3} lohnenswert ist.

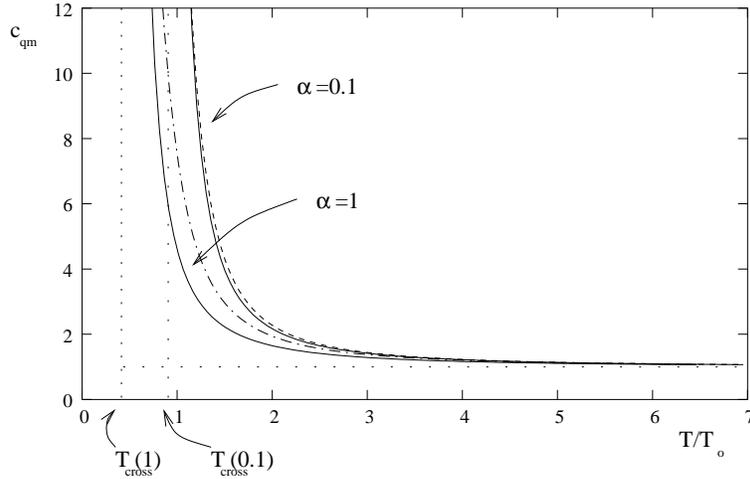


Abbildung 4.2: Quanten-Korrekturfaktor c_{qm} zu verschiedenen Dämpfungen $\alpha = \gamma/2\omega_b$ im allgemeinen Fall. Die gestrichelte Linie ist die dämpfungsunabhängige Näherung bis zur Ordnung T^{-2} , die gepunktet-gestrichelte Linie eine Ordnung höher (für $\alpha = 1$). Die Temperaturskala ist hier $T_0 = \hbar\omega_0/k_B$.

Situation für $T \ll T_{\text{cross}}$

Für sehr kleine Temperaturen dominieren die “bounce”-Trajektorien die Zerfallsraten. Man betrachtet also Lösungen, die um die “bounces” fluktuieren, $q(\tau) = q_B(\tau) + \xi(\tau)$, und spaltet die Wirkung auf in einen Anteil der “bounce”-Trajektorie S_B und einen Fluktuationsanteil. Dieser hat die Form

$$\frac{m}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \xi(\tau) K[q_B] \xi(\tau) \quad (4.28)$$

mit einem Fluktuationsoperator K , der wie auch S_B in [32] definiert ist. Für unsere Zwecke reicht es zu wissen, dass $K[q_B] \dot{q}_B(\tau) = 0$ gilt, der Operator also eine Eigenfunktion mit Eigenwert $\lambda_1 = 0$ besitzt, was die Freiheit der Phasenwahl für die “bounce”-Lösung anzeigt. Desweiteren muss es, da $\dot{q}_B(\tau)$ einen Knoten besitzt, nach dem “node-counting”-Theorem noch eine Eigenfunktion mit niedrigerem Eigenwert, also $\lambda_0 < 0$ geben. Integriert man nun die Fluktuationen aus, indem man wie gehabt über die Koeffizienten c_i der Eigenmodendarstellung des Operators K integriert, wiederholt sich das Problem eines formal divergenten Beitrages in

$$S[q] = S_B + \frac{m}{2} \sum_i \lambda_i [q_B] c_i^2. \quad (4.29)$$

Dieser divergente Term rührt vom negativen λ_0 her und spiegelt die Metastabilität des Systems wider. Der entsprechende Integrationsweg wird wie oben in die komplexe Ebene verschoben, sodass sich ein imaginärer Anteil der Zustandssumme ergibt, über den wiederum nach Gl. (4.7,4.8) die Zerfallsrate definiert werden kann. Schließlich ergibt sich

$$k = f_{\text{qm}} \exp[-S_B/\hbar]. \quad (4.30)$$

Der Vorfaktor hat dabei einen Anteil $\sim \sqrt{S_0/2\pi\hbar}$, der von der Integration der ersten Mode mit Eigenwert λ_1 herrührt. Ein weiterer Anteil besteht aus einem Quotienten von Funktionaldeterminanten ähnlich wie in Gl. (3.58); er berücksichtigt den Beitrag der höheren Moden und liefert entsprechend der Argumentation in Kapitel 3.3.2 für $T \rightarrow 0$ im wesentlichen eine Frequenz ω_0 . Im Fall $T = 0$ gibt es für unsere Situation des “quadratisch+kubischen” Potentials Gl. (4.39) exakte Lösungen, die für den Fall nicht zu starker Dämpfung durch

$$\begin{aligned} S_B &= S_0 \left(1 + \frac{45\zeta(3)}{\pi^3} \alpha + \mathcal{O}(\alpha^2) \right), \\ f_{\text{qm}} &= \sqrt{60} \omega_0 \sqrt{\frac{S_0}{2\pi\hbar}} (1 + 2.86\alpha + \mathcal{O}(\alpha^2)) \end{aligned} \quad (4.31)$$

gegeben sind, mit $S_0 = 36V_b/5\omega_0$ und der Riemann-Zahl $\zeta(3) \simeq 1.2$. Wir wollen auf thermische Korrekturen zur Zerfallsrate bei $T = 0$ nicht weiter eingehen, da es Schwierigkeiten gibt T_{cross} überhaupt zu erreichen, ebensowenig wie auf Skalenverhalten der Zerfallsrate in der Umgebung von T_{cross} (siehe dazu Fig. 11.1 in [83]). Wichtig war vielmehr eine Zusammenfassung darüber, wie sich die Zerfallsraten überhaupt ableiten lassen, sowie die Bereitstellung der entsprechenden Formeln, die wir nun auf unser Problem anwenden wollen.

4.2 Anwendung auf SWNTs

Wir hatten in Kapitel 3 gesehen, wie die Entartung der Minima des Potentials $v(y)$ durch kapazitive Kopplung aufgehoben wird. Hier soll die Kopplung so groß gemacht werden ($g \rightarrow g_c$), dass der Zustand $|R\rangle$ abgesenkt wird, während der Zustand $|L\rangle$ stark metastabil wird bei immer kleiner werdenden Barrieren, wie in Abb. (4.3) zu sehen. Dazu führen wir in der Nähe von g_c mit

$$\eta = \frac{g_c - g}{g_c} \quad (4.32)$$

einen weiteren dimensionslosen Parameter ein, der den Abstand zum Wert misst, bei dem die Barriere (also bei $\eta = 0$) verschwindet. Dann lässt sich θ aus Gl. (3.74) für kleine η entwickeln zu

$$\theta \simeq \sqrt{2} \eta^{\frac{1}{2}} + \frac{\eta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}}. \quad (4.33)$$

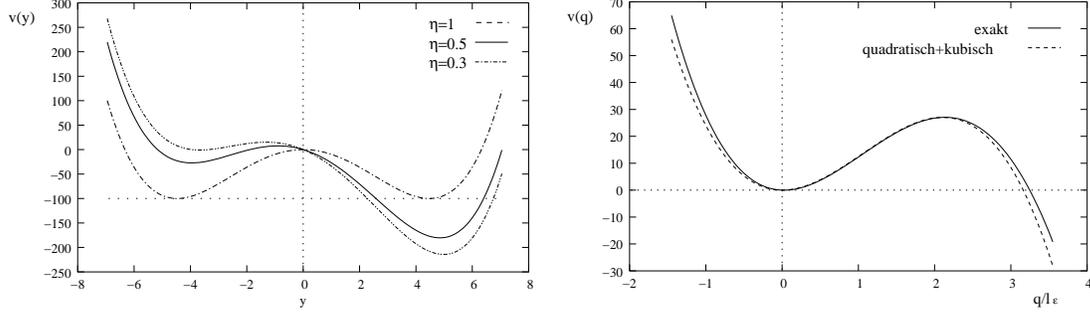


Abbildung 4.3: Links: Immer metastabiler werdendes Potential $v_{g,(\eta)}(y)$ für sinkendes η , bei $|\varepsilon/\Delta\varepsilon| = 20$.

Rechts: Metastabiler Bereich des Potentials für $|\varepsilon/\Delta\varepsilon| = 100$, $\eta = 0.05$ im Vergleich zum “quadratisch + kubischen” Potential Gl. (4.39).

Die Positionen der Energieminima und der Barriere verschieben sich und lauten in Entwicklung nach η

$$\begin{aligned}
 y_0 \equiv y_L &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \left(-1 - \sqrt{\frac{2}{3}} \eta^{\frac{1}{2}} + \frac{\eta}{9} - \frac{\eta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{6}} \right), \\
 y_b &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \left(-1 + \sqrt{\frac{2}{3}} \eta^{\frac{1}{2}} + \frac{\eta}{9} + \frac{\eta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{6}} \right), \\
 y_\infty \equiv y_R &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\eta}{9} + \dots \right).
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

Dem Entkommen aus dem metastabilen Zustand $|L\rangle$ in den stabilen Zustand $|R\rangle$ entspricht also eine realer Sprung der Balkenmitte um

$$\mathcal{A}_\infty - \mathcal{A}_0 \simeq \sqrt{3} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{1/2} l_\varepsilon. \tag{4.35}$$

Dieser Sprung wird für SWNTs nachweisbar sein, wie später in Tab. 4.2 zu sehen ist. Für die weiteren Berechnungen braucht man die neue Barrieren-Höhe $V_b = \xi_\varepsilon^{-1} \cdot v_{b,\eta}$, die nun durch

$$v_b = \frac{1}{4} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^2 \implies v_{b,\eta} = \left(\frac{2}{3} \right)^{\frac{7}{2}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^2 \eta^{\frac{3}{2}} \tag{4.36}$$

gegeben ist. Desweiteren errechnen sich die Frequenzen der harmonischen Näherung des Potentials um y_L über $v''|_{y_L}$ bzw. die des umgekehrten Potentials um y_b über $-v''|_{y_b}$. Diese sind in relevanter Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\eta})$ gleich, und lauten

$$\begin{aligned}
 \omega_0 &\equiv \omega_L = \omega_\varepsilon \times \left(\frac{8}{3} \right)^{\frac{1}{4}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{1}{4}}, \\
 \omega_b &= \omega_0.
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

Dies bedeutet, dass sich das Potential im metastabilen Bereich und in der Näherung $\eta \ll 1$ als “quadratisch + kubisches” Potential schreiben lässt. Bestimmt man die Koordinaten y_-, y_+ bei denen das Potential denselben Wert annimmt wie in der Potentialmulde (bei Erreichen von y_- ist das Potential also “durchtunnelt”), so findet man

$$\begin{aligned} y_- &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} + \frac{2\sqrt{2}}{3} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\sqrt{\eta}), \\ y_+ &= \sqrt{3} \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\sqrt{\eta}), \end{aligned} \quad (4.38)$$

und das Potential lässt sich in der dimensionsbehafteten Variablen $q = l_\varepsilon(y - y_L)$ bis auf eine Verschiebung um $\xi_\varepsilon^{-1}v(y_L)$ darstellen als

$$\begin{aligned} \xi_\varepsilon^{-1}(v(y) - v(y_L)) &= \frac{1}{4}(y - y_L)^2(y - y_-)(y - y_+)\xi_\varepsilon^{-1} \\ &\simeq \frac{1}{4}(y_- - y_L)(y_+ - y_L)(y - y_L)^2 \left(1 - \frac{y - y_L}{y_- - y_L}\right) \xi_\varepsilon^{-1} \\ &= \frac{1}{2}m_{\text{eff}}\omega_L^2 q^2 \left(1 - \frac{q}{\Delta q}\right) = V(q), \end{aligned} \quad (4.39)$$

mit der Tunnel-Länge $\Delta q = l_\varepsilon(y_- - y_L)$. Die Güte der Näherung ist in Abb. 4.3 zu sehen.

4.2.1 Quantentunneln bei $T=0$

Nun kann man eine erste Abschätzung für reines Quantentunneln ($T=0$) über die WKB-Tunnelrate erhalten. Aufgrund der Potentialdarstellung Gl. (4.39) lassen sich direkt die bekannten analytischen Werte für das “quadratisch+kubische” Potential verwenden [83]. Man erhält zunächst ohne Einfluss von Dämpfung für den Gamow-Faktor

$$\frac{S_0}{\hbar} = \frac{36}{5} \frac{V_b}{\hbar\omega_L} = 1.363 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{3}{2}} \eta^{\frac{5}{4}} \quad (4.40)$$

und für den Vorfaktor

$$f_0^{WKB} = \sqrt{60}\omega_L \sqrt{\frac{S_0}{2\pi\hbar}} = 1.72 \omega_\varepsilon \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{5}{4}} \eta^{\frac{7}{8}}, \quad (4.41)$$

wobei die Zahlenwerte analytisch sind. Im Fall Ohmscher Dämpfung kommen nach Gl. (4.31) Korrekturfaktoren hinzu, die aber erst bei moderater Dämpfung Einfluss nehmen. Bei $T = 0$ lautet die Tunnelrate also insgesamt

$$k^{WKB} \simeq \omega_\varepsilon \cdot A \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{5}{4}} \eta^{\frac{7}{8}} \exp \left\{ -B \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{3}{2}} \eta^{\frac{5}{4}} \right\}, \quad (4.42)$$

wobei die dämpfungsabhängigen Faktoren A, B in Tab. 4.1 angegeben sind: Die Tunnelrate

Q	α	ρ	A	B
50	0.01	0.99	1.82	1.41
5	0.1	0.90	2.21	1.60
0.5	1	0.41	6.64	3.74

Tabelle 4.1: Koeffizienten A, B für verschiedene Stärken der Dämpfung.

ε	$ \varepsilon/\Delta\varepsilon $	η	$V_b/k_B T_\varepsilon$	$\mathcal{A}_\infty - \mathcal{A}_0$	$T_{\text{cross}}/T_\varepsilon$
-0.001	27.8	0.207	17.6	1.2 nm	0.7
-0.01	278	0.0132	28.4	3.8 nm	1.1
-0.02	556	0.00577	32.8	5.3 nm	1.26
-0.1	2780	0.00084	45.7	12 nm	1.75

Tabelle 4.2: Überblick über Parameter-Werte zu Quantentunneln.

hängt also sehr sensibel vom Zusammenspiel der beiden Tuningparameter $|\varepsilon/\Delta\varepsilon|$ (mechanisch) und η (elektrostatistisch) ab. Unsere Näherung gilt nur dann, wenn einerseits die Potentialentwicklung Gl. (4.39) korrekt ist und wenn man andererseits im metastabilen Potential noch harmonisch nähern kann ($\hbar\omega_L/2 \ll V_b$), also gelten die Einschränkungen

$$\begin{aligned} \eta &\ll 1, \\ \left|\frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon}\right|^{\frac{3}{2}} \eta^{\frac{5}{4}} &\geq 2.65. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Tendenziell werden wir angesichts der Kleinheit von $\Delta\varepsilon$ versuchen, $|\varepsilon/\Delta\varepsilon|$ eher groß und η dementsprechend klein zu machen. Um einen Überblick zu gewinnen, welche Parameter-Bereiche zueinander passen, wählen wir sie derart, dass sich eine Tunnelrate $k^{\text{WKB}} = \tau_{\text{WKB}}^{-1}$ mit $\tau_{\text{WKB}} = 1$ Tag ergibt. Das heißt wir wollen eine Situation mit

$$\ln \left[\frac{k^{\text{WKB}}}{\omega_\varepsilon} \right] \simeq -29.2 \quad (4.44)$$

schaffen und nehmen dabei bewusst einen sehr niedrigen Qualitätsfaktor $Q = 5$ an, da es sich einerseits um den Qualitätsfaktor für die gedämpfte Bewegung um den metastabilen Zustand handelt (und nicht um das Q der freien Bewegung des Balkens ohne Kompression in der Diskussion in Kapitel 3), andererseits Q nicht zu hoch sein darf, da sich das System sonst nicht im thermischen Gleichgewicht befindet. Damit ergeben sich mögliche Kombinationen, die in der Tabelle 4.2 aufgeführt sind. Hierzu ist Folgendes zu bemerken: Zunächst fällt auf, dass, egal wie man die Tuningparameter aufeinander abstimmt, die Übergangs-Temperatur

$$\begin{aligned} T_{\text{cross}} &= \rho \frac{\hbar\omega_L}{2\pi k_B} \\ &= 0.193 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{1}{4}} T_\varepsilon \end{aligned} \quad (4.45)$$

immer im Bereich der Temperaturskala T_ε , also für unseren SWNT im Bereich von 0.3 – 0.7 mK liegt; das ist etwa eine Zehnerpotenz weniger als derzeit im Experiment erreichbarer. Man wird also bei SWNTs den direkten Übergang von thermischem Entkommen zu Quantentunneln nicht beobachten können, wenn man nicht deutlich unter die angenommene Länge von $0.1 \mu\text{m}$ geht.

Betrachten wir also den thermischen Zerfallsprozess. Wendet man die Formel (4.25) auf unser Problem an, so ergibt sich für das modifizierte Arrhenius-Gesetz

$$k \simeq \omega_\varepsilon \cdot c_{\text{qm}} \cdot 0.194 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^{\frac{1}{2}} \eta^{\frac{1}{4}} \exp \left[-0.24 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right|^2 \eta^{\frac{3}{2}} \frac{T_\varepsilon}{T} \right] \quad (4.46)$$

mit dem Quanten-Korrekturfaktor

$$c_{\text{qm}} \simeq \exp \left[+0.136 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta\varepsilon} \right| \eta^{\frac{1}{2}} \left(\frac{T_\varepsilon}{T} \right)^2 \right]. \quad (4.47)$$

Gerechnet wird für die Parameter aus der zweiten Zeile von Tab. 4.2, in der die beiden Parameter ε und η etwa die gleiche Größenordnung habe. Setzt man diese ein, so erhält man

$$\frac{k}{\omega_\varepsilon} \simeq c_{\text{qm}} \cdot 1.1 \exp \left[-28.1 \frac{T_\varepsilon}{T} \right] \quad (4.48)$$

und

$$c_{\text{qm}} \simeq \exp \left[+4.34 \left(\frac{T_\varepsilon}{T} \right)^2 \right]. \quad (4.49)$$

Wir zeigen die thermische Zerfallsrate mit und ohne Quantenkorrekturen in Abb. 4.4. Auffällig ist, dass der klassisch berechnete Wert ohne Korrekturen den Nulltemperatur-

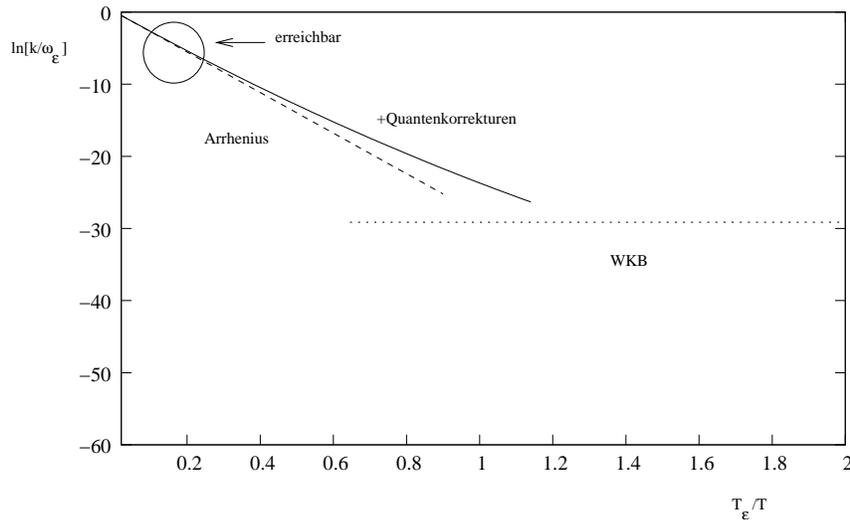


Abbildung 4.4: Zerfallsraten für den Fall sehr kleiner (nicht-erreichbarer) Temperaturen.

τ	24 h	1 min	1 s	1 ms
$\ln \left[\frac{1}{\tau \omega_\varepsilon} \right]$	-29.2	-22	-17.8	-11

Tabelle 4.3: Umrechnung von mittlerer Verweilzeit und den verwendeten logarithmischen Ausdrücken.

wert der WKB-Näherung schon bei etwa der Crossover-Temperatur erreicht. Dies liegt einzig am Vorfaktor der WKB-Formel, der hier mit einem Faktor $\ln(57)$ gegenüber der “attempt frequency” zu Buche schlägt, welche in der thermischen Ratenformel fast keinen Beitrag liefert. Dies zeigt einerseits, dass die Rolle des Vorfaktors unterschätzt wird [83], und bestätigt andererseits, dass schon lange vor Erreichen der Crossover-Temperatur Quantenkorrekturen zu erwarten sind. Zunächst müssen aber die äußeren Parameter wieder geändert werden, sonst wird die Rate im bestenfalls erreichbaren Temperaturbereich von $5 - 50 T_\varepsilon$ viel zu hoch: Ein im Experiment präpariertes System würde zu schnell zerfallen. Hinzu kommt, dass mit den jetzigen Parametern die Bedingung für das Bestehen eines thermisch metastabilen Zustandes

$$k_B T \ll V_b \quad (4.50)$$

nicht mehr erfüllt ist.

Solange neue Vorschläge zur weiteren Kühlung nanomechanischer Systeme wie z.B. Laserkühlung [85] noch nicht realisiert sind, und damit der Quantenbereich unzugänglich ist, bleibt also zu untersuchen, ob wenigstens Quantenkorrekturen zum Arrhenius-Gesetz beobachtet werden können.

4.2.2 Quantenkorrekturen zur thermischen Zerfallsrate

Betrachten wir also die Situation für höhere Temperaturen und wählen das Fenster $2 - 20$ mK, welches prinzipiell erreichbar ist und für welches messbare Quantenkorrekturen zu erwarten sind. Desweiteren bestimmen wir Sätze von Parametern, in denen $V_b \simeq 150 k_B T_\varepsilon$ gilt, wir also die Bedingung Gl. (4.50) erfüllen. Gleichzeitig ist damit die erwartete Verweilzeit τ_{Arrh} für den linken Rand des Temperatur-Intervalls wieder auf ca. einen Tag festgelegt,

$$\ln \left[\frac{k^{\text{Arrh}}(T \simeq 5T_\varepsilon)}{\omega_\varepsilon} \right] \simeq -29.2. \quad (4.51)$$

Um die Figuren lesbarer zu machen, werden in Tab. 4.3 einige Verweilzeiten und die entsprechenden Logarithmen nach Gl. (4.51) nebeneinandergestellt. Wir nehmen weiterhin den Fall $Q = 5$; die Dämpfung spielt aber hier nur eine untergeordnete Rolle, da sie nur im Vorfaktor vorkommt; der führende Term der Quantenkorrekturen c_{qm} war ja dämpfungsunabhängig. Wir erhalten also die in Tabelle 4.4 aufgeführten Kombinationen der Parameter ε und η , für die obige Bedingungen erfüllt sind. Rechnet man mit den Werten aus Zeile

ε	$ \varepsilon/\Delta\varepsilon $	η	$V_b/k_B T_\varepsilon$	$T_{\text{cross}}/T_\varepsilon$
-0.01	278	0.040	$\simeq 150$	1.44
-0.02	556	0.0158	$\simeq 150$	1.62
-0.05	1390	0.00469	$\simeq 150$	1.88
-0.1	2780	0.00188	$\simeq 150$	2.12

Tabelle 4.4: Überblick über Parameter-Werte zu Quantenkorrekturen zum thermischen Entkommen.

drei, so ergibt sich schließlich

$$\frac{k}{\omega_\varepsilon} \simeq c_{\text{qm}} \cdot 1.9 \exp \left[-149 \frac{T_\varepsilon}{T} \right] \quad (4.52)$$

und für die Quantenkorrektur

$$c_{\text{qm}} \simeq \exp \left[+12.9 \left(\frac{T_\varepsilon}{T} \right)^2 \right]. \quad (4.53)$$

Mit sinkenden Temperaturen weicht also das Temperaturverhalten der Zerfallsrate zunehmend vom klassischen Arrhenius-Gesetz ab, wie in Abb. 4.5 zu sehen ist. Bildet man den

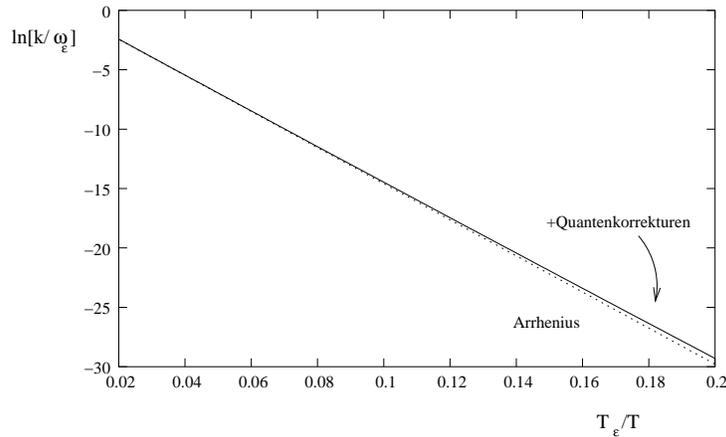


Abbildung 4.5: Zerfallsrate mit und ohne Quantenkorrektur.

Quotienten aus der tatsächlich zu erwartenden Verweilzeit und der klassischen Verweilzeit, was natürlich dem inversen Korrekturfaktor entspricht, so findet man dass für $T \rightarrow 5T_\varepsilon$ schon eine Abweichung um fast 50% zu erwarten ist (Abb. 4.6). Insgesamt wird klar, dass man bei derzeit experimentell realisierbaren Temperaturen noch nicht in der Lage sein wird, dass Quantenkorrekturen gemessen werden können. Allerdings beginnt man schon, in den physikalisch interessanten Bereich hinzugelangen, sodass nach zukünftigen weiteren Verbesserungen der experimentellen Situation (Kühlung) ein Nachweis durchaus möglich

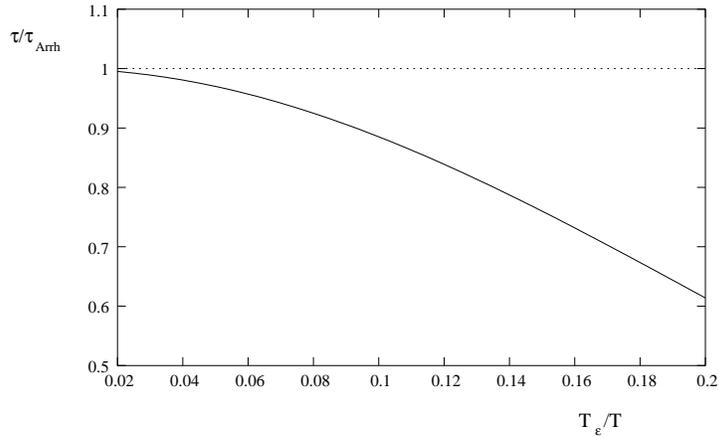


Abbildung 4.6: Quotient aus mittlerer Verweildauer zu mittlerer Verweildauer nach reinem Arrhenius-verhalten.

sein sollte. Auch sind wir auf eine genauere Analyse, in welcher Art die äußeren Parameter der mechanischen Kompression und der elektrostatischen transversalen Kräfte gewählt werden müssen, nicht eingegangen, da auch in diesem Fall eine experimentelle Realisierung (in dieser Kombination) noch nicht besteht, obwohl auf diesem Gebiet zur Zeit große Fortschritte gemacht werden [2]. Ob irgendwann wirklich der Übergang zum Quantentunneln beobachtet werden kann, wird allerdings auch davon abhängen, wie stark die Dissipation für den in ein Minimum des Potentials Abb. 4.3 gebrachten Nanotube tatsächlich ist. Die Quantenkorrekturen selbst sind von diesem Problem zwar nicht betroffen, aber die Übergangs-Temperatur würde für stärker gedämpfte Systeme noch kleiner werden.

Resümee

In dieser Arbeit wurden quantenmechanische Effekte untersucht, die sich in einem Balkenresonator mit Dimensionen auf Nanometerskala ergeben können. Der Resonator selbst kann zunächst in guter Näherung durch einen harmonischen Oszillator dargestellt werden, dessen Koordinate die Auslenkungsamplitude der fundamentalen Schwingungsmode in Balkenmitte ist, woraus sich sofort die thermischen und die Quantenfluktuationen ergeben. Die relevante Längenskala der Quantenfluktuationen l_0 ist mit der Fundamentalfrequenz des Balkens ω_0 und dessen Masse m über die Beziehung $\omega_0 \cdot l_0^2 \simeq \hbar/m$ verbunden. Obwohl SWNTs, MWNTs und auch Balken aus Halbleiter-Materialien Frequenzen ω_0 im GHz-Bereich erreichen können, haben allenfalls die Quantenfluktuationen von etwa $0.1 \mu\text{m}$ langen SWNTs eine Chance, im Experiment beobachtet werden zu können, auch wenn diese mit $(0.01 \text{ nm})^2$ immer noch sehr klein sind. Tatsächlich ist es mit auf dem Einzelelektronentransistor basierenden, ultrasensitiven Sensoren [44] aber prinzipiell möglich, Fluktuationen dieser Größenordnung zu beobachten. Darüberhinaus konnten SWNTs bereits im Experiment doppelseitig eingespannt und deren thermische Fluktuationen gemessen werden [2]. Im weiteren beschäftigte sich die Arbeit mit der Frage, wie solch kleine Fluktuationen verstärkt werden können. Dazu wird zum einen die Methode vorgeschlagen, den Oszillator dynamisch durch parametrische Resonanz anzuregen. Dies ist durch kapazitive Kopplungen möglich und bereits für Balken größerer Ausdehnung realisiert worden [71], wobei dort aber die Auslenkung selbst unter zusätzlicher externer Anregung verstärkt wurde. Es zeigt sich, dass die externe Anregung für die Fluktuationen der Auslenkung σ_{xx} nicht relevant ist, wohl aber der parametrische Antrieb. So wird σ_{xx} eine zeitlich periodische Funktion mit Minimalwert kleiner als $\sigma_{xx}(0)$ (Squeezing) und einem Maximalwert, der in der Nähe der Resonanzbedingung bis zu vier Größenordnungen höher als $\sigma_{xx}(0)$ werden kann; er wird allerdings nicht instantan erreicht, sondern durch einen Aufschaukelvorgang, der umso langsamer vonstatten geht, je schwächer die Dämpfung des Resonators ist. Eine zweite Möglichkeit besteht darin, die Fluktuationen mit einer statischen Methode zu erhöhen indem eine longitudinal wirkende, kompressive Kraft auf den Resonator ausgeübt wird. Damit lässt sich die Skala l der Fluktuationen gemäß $\omega \cdot l^2 \simeq \hbar/m$ nach oben schieben, da die fundamentale Frequenz ω verschwindet, wenn die Euler-Instabilität erreicht wird, wenn also die kompressive Kraft den kritischen Wert erreicht, bei dem sich der Balken klassisch zur Seite biegt. Unmittelbar vor Erreichen der Instabilität weicht die Anregungsfrequenz des Balkens aber, bedingt durch den stabilisierenden quartischen Term in der Biege-Energie, vom harmonischen Verhalten ab und bleibt endlich. Die sich nun er-

gebende Längenskala $l_e \sim 0.1$ nm ist rein quantenmechanischer Natur und um einen Faktor zehn gegenüber dem unbelasteten Fall verstärkt. Das Problem bei dieser Methode ist, dass durch gleichzeitige Verminderung der Frequenzskala die Temperatur T^* , oberhalb derer die Quantenfluktuationen in den thermische Fluktuationen untergehen, unterhalb der in typischen Kryostaten erreichten Temperaturen von 7 mK abgesenkt wird. Daher muss man nach besseren Kühlmethoden, wie zum Beispiel Laserkühlung [85], Ausschau halten.

Jenseits der Euler-Instabilität ist das effektive Potential des Systems durch das aus der Landau-Theorie bekannte Doppelmuldenpotential gegeben; der Balken wird dann klassisch entweder “nach links” oder “nach rechts” gebogen. Sehr nahe der Instabilität kann sich der Balken aber quantenmechanisch in einer Superposition dieser Zustände befinden: Dies führt zu einer makroskopischen Quanten-Kohärenz (MQC) von unterscheidbaren mechanischen Makrozuständen [84], analog der Situation in SQUIDs, wo makroskopische Quanten-Kohärenz aus Zuständen “im Uhrzeigersinn” und “im Gegen-Uhrzeigersinn” fließender Ströme auftritt. Allerdings ist die niedrigste Anregungsfrequenz des Balkens, das Tunnelsplitting im entsprechenden quantenmechanischen Zweizustandssystem, lediglich einige MHz groß und deshalb nur bei sehr niedrigen (noch nicht erreichbaren) Temperaturen zu beobachten, es sei denn, man geht sehr nahe an die Instabilität. Die Kohärenz der Zustände sollte dabei aufgrund der sehr hohen Qualitätsfaktoren von SWNT nicht automatisch durch Dämpfungseffekte zerstört werden.

Schließlich kann man durch zusätzliche kapazitive Kopplungen eine Situation schaffen, in welcher der Zustand des Balkens, zum Beispiel Biegung “nach links”, metastabil wird, und mögliche Zerfälle dieses Zustandes in den stabilen Zustand Biegung “nach rechts” betrachten. Dabei ergibt sich, dass die Crossover-Temperatur von thermischem Entkommen zu Quantentunneln (MQT) mit ~ 0.7 mK ebenfalls zu niedrig für typische Temperaturen in Kryostaten ist. Im zugänglichen Bereich machen sich aber dennoch Quanten-Einflüsse im Sinne schwacher Korrekturen der Temperaturabhängigkeit des klassischen Arrhenius-Gesetzes bemerkbar, die von der Größenordnung her einen Faktor zwei in der absoluten Zerfallsrate ausmachen.

Als Ausblick lässt sich festhalten, dass Quanteneffekte in mechanischen Systemen wie SWNTs wohl schon bald nachweisbar sein dürften. Allein die Kombination aus doppelseitig eingespannten SWNTs [2], gekoppelt an einen ultrasensiblen SET [44], sollte bei Kryostatentemperaturen für den Nachweis von makroskopischen Quantenfluktuationen ausreichend sein. Mit der parametrischen Resonanz und der piezoelektrischen Kompression stehen weitere Möglichkeiten bereit, die Fluktuationen zu verstärken. Dazu wird es aber wichtig sein, die für μm -lange MWNTs erfolgreich durchgeführte Anregung mittels *ac*- und *dc*-Spannungen [65] auf sehr kurze SWNTs auszuweiten. Auch für den Nachweis von MQC oder MQT müssen SWNTs mit solchen Techniken manipuliert werden können; dort stehen allerdings momentan noch die “zu hohen” im Kryostaten erreichbaren Temperaturen im Weg, wobei es auch schon Vorschläge gibt, nanomechanische Systeme noch raffinierter zu kühlen [85]. Im Hinblick auf die prinzipiell bereits mit heutigen Mitteln detektierbaren Quantenfluktuationen kommt dem Begriff “Quantenmechanik” für makro(nano)skopische Systeme wie SWNTs bereits wörtliche Bedeutung zu.

Anhang A

Korrelationsfunktionen zur parametrischen Resonanz

Hier werden die zu den Korrelationsfunktionen aus Kapitel 2 fehlenden Erwartungswerte berechnet. Zur Berechnung von $\langle p^2 \rangle$ verwenden wir

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q_f^2} J_1|_{q_f=0} = [c_2 Q_f^2 + c_1(Q_i, q_i) Q_f + c_0(Q_i, q_i)] \times J_1(0, t|Q_i, q_i). \quad (\text{A.1})$$

In Kapitel 2 schon eingeführt war

$$c(Q_i, q_i) = m(\alpha_2 Q_i + \Gamma) + 2i\kappa_{12} q_i. \quad (\text{A.2})$$

Die weiteren auftretenden Funktionen sind

$$\begin{aligned} c_2 &= m^2 \alpha_1^2, \\ c_1 &= 2m\alpha_1 \cdot c(Q_i, q_i), \\ c_1(Q_i, 0) &= 2m^2 \alpha_1 (\alpha_2 Q_i + \Gamma), \\ c'_1|_{q_i=0} &= 4im\alpha_1 \kappa_{12}, \\ c_0 &= 2\hbar\kappa_{11} + c^2(Q_i, q_i), \\ c_0(Q_i, 0) &= 2\hbar\kappa_{11} + m^2 (\alpha_2 Q_i + \Gamma)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dann ist mit der Kurzschreibweise ρ_0 statt ρ_{osc}

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int dQ_f (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial q_f^2} \rho_R(Q_f, q_f, t) \Big|_{q_f=0} \\
&= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i \rho_0(Q_i, q_i) \int dQ_f (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial q_f^2} J(Q_f, q_f = 0, t) \Big|_{q_f=0} \\
&= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i J_1(0, t | Q_i, q_i) \rho_0(Q_i, q_i) \int dQ_f (c_2 Q_f^2 + c_1 Q_f + c_0) \exp \left\{ -\frac{im\alpha_{1,0}}{\hbar} q_i Q_f \right\} \\
&= \int dQ_i \int dq_i J_1(Q_i, q_i) \rho_0(Q_i, q_i) \left[c_2 \left(\frac{i\hbar}{m\alpha_{1,0}} \right)^2 \delta''(q_i) + c_1 \left(\frac{i\hbar}{m\alpha_{1,0}} \right) \delta'(q_i) + c_0 \delta(q_i) \right] \\
&= \int dQ_i \left[c_2 \frac{-\hbar^2}{(m\alpha_{1,0})^2} (J_1 \rho_0)'' \Big|_0 + \frac{\hbar}{im\alpha_{1,0}} (c_1 J_1 \rho_0)' \Big|_0 + (c_0 J_1 \rho_0) \Big|_0 \right] \\
&= \int dQ_i c_2 \frac{-\hbar^2}{(m\alpha_{1,0})^2} (J_1'' \rho_0 + 2J_1' \rho_0' + J_1 \rho_0'') \Big|_0 \\
&\quad + \int dQ_i \frac{\hbar}{im\alpha_{1,0}} (c_1' J_1 \rho_0 + c_1 J_1' \rho_0 + c_1 J_1 \rho_0') \Big|_0 + \int dQ_i (c_0 J_1 \rho_0) \Big|_0 \\
&= \frac{\alpha_1^2}{\alpha_{1,0}^2} \left\{ 2\hbar\kappa_{22} + m^2 \alpha_{2,0}^2 \langle x_0^2 \rangle + 2m^2 \alpha_{2,0} \Gamma_0 \langle x_0 \rangle + m^2 \Gamma_0^2 \right. \\
&\quad \left. - 2m \int dQ_i \left[(\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0) \frac{\hbar}{i} \rho_0' \right]_0 + \langle p_0^2 \rangle \right\} \\
&\quad + 2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \int dQ_i \left[2\hbar\kappa_{12} \rho_0 + m(\alpha_2 Q_i + \Gamma) \left(-m(\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0) \rho_0 + \frac{\hbar}{i} \rho_0' \right) \right]_0 \\
&\quad + 2\hbar\kappa_{11} + m^2 \alpha_2^2 \langle x_0^2 \rangle + 2m^2 \alpha_2 \Gamma \langle x_0 \rangle + m^2 \Gamma^2 \\
&= \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \right)^2 \langle p_0^2 \rangle + m^2 \left(\alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \alpha_{2,0} \right)^2 \langle x_0^2 \rangle + 2m \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \left(\alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \alpha_{2,0} \right) \frac{1}{2} \langle x_0 p_0 + p_0 x_0 \rangle \\
&\quad + 2m \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \left(\Gamma - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 \right) \langle p_0 \rangle + 2m^2 \left(\alpha_2 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \alpha_{2,0} \right) \left(\Gamma - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 \right) \langle x_0 \rangle \\
&\quad + m^2 \left(\Gamma - \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \Gamma_0 \right)^2 + 2\hbar \left(\kappa_{11} + 2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \kappa_{12} + \frac{\alpha_1^2}{\alpha_{1,0}^2} \kappa_{22} \right) \\
&= \dot{f}_1^2 \langle p_0^2 \rangle + m^2 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right)^2 \langle x_0^2 \rangle + 2m\dot{f}_1 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right) \frac{1}{2} \langle x_0 p_0 + p_0 x_0 \rangle \\
&\quad + 2m\dot{f}_1 \dot{G}(t) \langle p_0 \rangle + 2m^2 \left(\dot{f}_2 - \gamma/2\dot{f}_1 \right) \dot{G}(t) \langle x_0 \rangle + m^2 (\dot{G}(t))^2 \\
&\quad + 2\hbar(\kappa_{11} + 2\dot{f}_1 \kappa_{12} + \dot{f}_1^2 \kappa_{22}). \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Für den Erwartungswert des Antikommutators ergibt sich unter Verwendung von Gl.(A.2) die ähnliche Rechnung

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\langle\{x, p\}\rangle &= \int dQ_f \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \rho(Q_f, q_f, t|Q_i, q_i)|_{q_f=0} \\
&= \frac{1}{N} \int dQ_i \int dq_i \rho_{\text{osc}} J_1 \int dQ_f Q_f (m\alpha_1 Q_f + c(Q_i, q_i)) \exp\left(-\frac{im\alpha_{1,0}}{\hbar} q_i Q_f\right) \\
&= \frac{1}{m\alpha_{1,0}} \int dQ_i \left[-\hbar^2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} (\rho_{\text{osc}} J_1)'' + \frac{\hbar}{i} (c\rho_{\text{osc}} J_1)' \right]_{q_i=0} \\
&= \frac{1}{m\alpha_{1,0}} \left\{ \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \langle p_0^2 \rangle + \int dQ_i 2\hbar^2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \frac{i}{\hbar} m(\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0) \rho'_{\text{osc}} - \hbar^2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}} \rho_{\text{osc}} \times \right. \\
&\quad \left[-\frac{2}{\hbar} \kappa_{22} - \frac{m^2}{\hbar^2} ((\alpha_{2,0} Q_i)^2 + 2\alpha_{2,0} Q_i \Gamma_0 + \Gamma_0^2) \right] \\
&\quad \left. + \frac{\hbar}{i} \left[2i\kappa_{12} + m(\alpha_2 Q_i + \Gamma) \rho'_{\text{osc}} - m(\alpha_2 Q_i + \Gamma) \frac{i}{\hbar} m(\alpha_{2,0} Q_i + \Gamma_0) \rho_{\text{osc}} \Big|_{q_i=0} \right] \right\} \\
&= \frac{1}{m} \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \langle p_0^2 \rangle + \left(m \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \alpha_{2,0}^2 - m \frac{\alpha_2 \alpha_{2,0}}{\alpha_{1,0}} \right) \langle x_0^2 \rangle + \left(-\frac{2\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \alpha_{2,0} + \frac{\alpha_2}{\alpha_{1,0}} \right) \langle \{x_0, p_0\} \rangle \\
&\quad + \left(-2 \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \Gamma_0 + \frac{1}{\alpha_{1,0}} \Gamma \right) \langle p_0 \rangle + \left[2m \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \alpha_{2,0} \Gamma_0 - \frac{m}{\alpha_{1,0}} (\alpha_2 \Gamma_0 + \alpha_{2,0} \Gamma) \right] \langle x_0 \rangle \\
&\quad + m \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \Gamma_0^2 - \frac{m}{\alpha_{1,0}} \Gamma \Gamma_0 + \frac{2\hbar}{m\alpha_{1,0}} \kappa_{12} + \frac{2\hbar}{m} \frac{\alpha_1}{\alpha_{1,0}^2} \kappa_{22} \\
&= \frac{m}{2} \frac{\partial}{\partial t} [f_2 - \gamma/2f_1]^2 \langle x_0^2 \rangle + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial t} f_1^2 \langle p_0^2 \rangle + \frac{\partial}{\partial t} [f_1(f_2 - \gamma/2f_1)]^2 \frac{1}{2} \langle \{x_0, p_0\} \rangle \\
&\quad + \frac{2\hbar}{m} f_1 (\kappa_{12} + f_1 \kappa_{22}) \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} [m((f_2 - \gamma/2f_1)G(t)) \langle x_0 \rangle + (f_1 G(t)) \langle p_0 \rangle + mG(t)^2]. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Mit diesen Ergebnissen werden in Kapitel 2 nun σ_{pp} und σ_{xp} berechnet.

Literaturverzeichnis

- [1] V.I. Arnold: *Mathematische Methoden der klassischen Mechanik*. Birkhäuser, 1988.
- [2] B. Babić, J. Furer, S. Sahoo, S. Farhangfar und C. Schönenberger, *cond-mat* **0307252** (2003).
- [3] R. Balian: *From Microphysics to Macrophysics vol. II*. Springer, 1992.
- [4] E. del Barco, N. Vernier, J.M. Hernandez, J. Tejada, E.M. Chudnovsky, E. Molins und G. Bellessa, *Europhys. Lett.* **47** (1999), 722.
- [5] F. Beil und E. Weig, *persönliche Mitteilung* (2003).
- [6] D.S. Bethune, C.H. Klang, M.S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez und R. Beyers, *Nature* **363** (1993), 605.
- [7] M.P. Blencowe und M.N. Wybourne, *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000), 3485.
- [8] M.F. Bocko und R. Onofrio, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996), 755.
- [9] E. Buks und M.L. Roukes, *Phys. Rev. B* **63** (2001), 033402.
- [10] E. Buks und M.L. Roukes, *Europhys. Lett.* **54** (2001), 220.
- [11] E. Buks und M.L. Roukes, *J. Microelectromech. Syst.* **11** (2002), 802.
- [12] A.O. Caldeira und A.J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981), 211.
- [13] S.M. Carr, W.E. Lawrence und M.N. Wybourne, *Phys. Rev. B* **64** (2001), 220101.
- [14] H.B. Chan, V.A. Aksyuk, R.N. Kleiman, D.J. Bishop und F. Capasso, *Science* **291** (2001), 1941.
- [15] J. Clarke, A.N. Cleland, M.H. Devoret, D. Esteve und J.M. Martinis, *Science* **239** (1988), 992.
- [16] A.N. Cleland: *Foundations of Nanomechanics*. Springer, 2003.
- [17] A.N. Cleland, J.M. Martins und J. Clarke, *Phys. Rev. B* **36** (1987), 58.

- [18] S. Coleman, *Phys. Rev. D* **15** (1977), 2929.
- [19] H.G. Craighead, *Science* **290** (2000), 1532.
- [20] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert und R.E. Smalley, *Nature* **384** (1996), 147.
- [21] A.C. Dillon, K.M. Jones, T.A. Bekkedahl, C.H. Kiang, D.S. Bethune und M.J. Heben, *Nature* **386** (1996), 377.
- [22] A. Erbe, C. Weiss, W. Zwerger und R.H. Blick, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 096106.
- [23] M.R. Falvo, G.J. Clary, R.M. Taylor, V. Chi, F.P.B. Jr, S. Washburn und R. Superfine, *Nature* **389** (1997), 582.
- [24] R.P. Feynman und F.L. Vernon, *Ann. Phys. (N.Y.)* **24** (1963), 118.
- [25] J.R. Friedman, V. Patel, W. Chen, S.K. Tolpygo und J.E. Lukens, *Nature* **406** (2000), 43.
- [26] G. Gamow, *Z. Phys* **51** (1928), 204.
- [27] C.W. Gardiner: *Quantum Noise*. Springer, 1991.
- [28] A. Garg, *cond-mat* **0003115** (2000).
- [29] U. Gavish, Y. Levinson und Y. Imry, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 216807.
- [30] M. Gerthsen: *Gerthsen Physik*. Springer, 2003 (22.Auflage).
- [31] H. Grabert, P. Hänggi und P. Talkner, *Phys. Rev. A* **19** (1979), 2440.
- [32] H. Grabert, P. Olschowski und U. Weiss, *Phys. Rev. B* **36** (1987), 1931.
- [33] H. Grabert, P. Schramm und G.L. Ingold, *Physics Reports* **168** (1988), 115.
- [34] E.R. Hansen: *A Table of Series and Products*. Prentice-Hall, INC., 1975.
- [35] J. Honerkamp: *Stochastische Dynamische Systeme*. VCH Verlagsgesellschaft, 1990.
- [36] X.M.H. Huang, C.A. Zorman, M. Mehregany und M.L. Roukes, *Nature* **421** (2003), 496.
- [37] F. Hund, *Z. Phys.* **43** (1927), 805.
- [38] S. Iijima, *Nature* **354** (1991), 56.
- [39] S. Iijima und T. Ichihashi, *Nature* **363** (1993), 603.
- [40] G.L. Ingold, *Preprint quant-ph* **0208026** (2002).

- [41] P. Jung und P. Hänggi, *Phys. Rev. A* **44** (1991), 8032.
- [42] E. Kamke: *Differentialgleichungen*. Chelsea Publishing Company, 1971.
- [43] J. Kirschbaum, E.M. Höhberger, R.H. Blick, W. Wegscheider und M. Bichler, *Appl. Phys. Lett.* **81** (2002), 280.
- [44] R.G. Knobel und A.N. Cleland, *Nature* **424** (2003), 291.
- [45] S. Kohler, T. Dittrich und P. Hänggi, *Phys. Rev. E* **55** (1997), 300.
- [46] H.A. Kramers, *Physica (Utrecht)* **7** (1940), 284.
- [47] A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos und M.M.J. Treacy, *Phys. Rev. B* **58** (1998), 14013.
- [48] L.D. Landau und E.M. Lifshitz: *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1958.
- [49] L.D. Landau und E.M. Lifshitz: *Lehrbuch der Theoretischen Physik Band VII Elastizitätstheorie*. Akademie Verlag, 1975.
- [50] J.S. Langer, *Ann. Phys. (N.Y.)* **41** (1967), 108.
- [51] W.E. Lawrence, *Physica B* **316-317** (2002), 448.
- [52] A.J. Leggett, *J. Phys. Cond. Matt.* **14** (2002), R415.
- [53] A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg und W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59** (1987), 1.
- [54] A.J. Leggett und A. Garg, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985), 857.
- [55] G.B. Lesovik und R. Loosen, *JETP Lett.* **65** (1997), 295.
- [56] R. Lifshitz und M.C. Cross, *Phys. Rev. B* **67** (2003), 134302.
- [57] E.D. Minot, Y. Yaish, V. Sazonova, J.Y. Park, M. Brink und P.L. McEuen, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), 156401.
- [58] H. Monien, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 126402.
- [59] C. Monroe, D.M. Meekhof, B.E. King und D.J. Wineland, *Science* **272** (1996), 1131.
- [60] U. München und S. Physik, <http://www.physik.uni-muenchen.de/didaktik/> .
- [61] H.S. Nalwa: *Nanostructured Materials and Nanotechnology*. Academic Press, 2002.
- [62] E. Nelson, *Phys. Rev.* **150** (1966), 1079.
- [63] G. Parisi: *Statistical Field Theory*. Addison-Wesley, 1988.

- [64] L. Pescini, H. Lorenz und R.H. Blick, *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003), 352.
- [65] P. Poncharal, Z.L. Wang, D. Ugarte und W.A. de Heer, *Science* **283** (1999), 1513.
- [66] T. Poston und I. Stewart: *Catastrophe Theory Theory and its Applications*. Pitman, 1978.
- [67] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling und B.P. Flannery: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1992.
- [68] G. Roddenberry: *First Contact*. Star Trek, 1996.
- [69] M.L. Roukes, *Physica B* **263-264** (1999), 1.
- [70] M.L. Roukes, *Physics World* **14** (2001), 25.
- [71] D. Rugar und P. Grütter, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991), 699.
- [72] S. Sapmaz, Y.M. Blamter, L. Gurevich und H.S.J. van der Zant, *Phys. Rev. B* **67** (2003), 235414.
- [73] D.J. Scalapino, M. Sears und R. Ferrell, *Phys. Rev. B* **6** (1972), 3409.
- [74] W.P. Schleich: *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley-VCH, 2001.
- [75] C. Schönenberger und L. Forrò, *Physics World* **13** (2000), 37.
- [76] K. Schwab, E.A. Henriksen, J.M. Worlock und M.L. Roukes, *Nature* **404** (2000), 974.
- [77] R.I. Shekter, Y. Galperin, L.Y. Gorelik, A. Isacson und M. Jonson, *J. Phys. Cond. Matt.* **15** (2003), R441.
- [78] H. Svensmark und K. Flensberg, *Phys. Rev. A* **47** (1993), R23.
- [79] S.J. Tans, M.H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R.E. Smalley, L.J. Geerligs und C. Dekker, *Nature* **386** (1997), 474.
- [80] S.J. Tans, A.R.M. Verschueren und C. Dekker, *Nature* **393** (1998), 49.
- [81] M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen und J.M. Gibson, *Nature* **381** (1996), 678.
- [82] C.H. van der Wal, A.C.J. ter Haar, F.K. Wilhelm, R.N. Schouten, C.J.P.M. Harmans, T.P. Orlando, S. Lloyd und J.E. Mooij, *Science* **290** (2000), 773.
- [83] U. Weiss: *Quantum Dissipative Systems*. World Scientific, 1993.
- [84] P. Werner und W. Zwerger, *preprint cond-mat 0308205 v2* (2003), accepted by Europhys. Lett.
- [85] I. Wilson-Rae, P. Zoller und A. Imamoglu, *cond-mat 0306724* (2003).

-
- [86] E.W. Wong, P.E. Sheehan und C.M. Lieber, *Science* **277** (1997), 1971.
- [87] B.I. Yakobson, C.J. Brabec und J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), 2511.
- [88] M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelley und R.S. Ruoff, *Science* **287** (2000), 637.
- [89] M.F. Yu, G.J. Wagner, R.S. Ruoff und M.J. Dyer, *Phys. Rev. B* **66** (2002), 073406.
- [90] C. Zerbe und P. Hänggi, *Phys. Rev. E* **52** (1995), 1533.

Danksagung

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn Prof. Wilhelm Zwerger für die interessante Themenstellung, seine ständige Disponibilität für Hilfestellungen und Diskussionen, und seine Impulse zu neuen Ideen und Betrachtungsweisen; aber auch dafür, dass er mir während der Anfangsphase der Arbeit eine Kooperation mit der Universität “La Sapienza” in Rom ermöglicht hat.

Ich freue mich, dass sich Prof. Jan von Delft, bei dem ich einiges an für die Arbeit wichtiger Physik gelernt habe, als Zweitgutachter zur Verfügung gestellt hat, und danke ihm dafür. Bei Herrn Prof. Herbert Wagner möchte ich mich dafür bedanken, dass ich als Übungsleiter an vielen seiner interessanten Vorlesungen teilhaben konnte, sowie generell für die angenehme Lehrstuhlatsmosphäre, für die ich auch allen anderen Lehrstuhlangehörigen der letzten Jahre danke.

Dabei gilt mein Dank vor allem Dr. Jens Schmalzing und Robert Dahlke, die mit mir die letzte Bastion des Lehrstuhls Wagner gebildet haben, für deren unzähligen Hilfen in allen Bereichen, Dr. Sigmund Stintzing und Caroline Lesperance, dem geheimen Zentrum des Lehrstuhls, Dr. Nikhil Chandra und Dr. Christoph Weiß für Hilfestellungen in der Anfangsphase der Arbeit, Stefano Cerrito per varie discussioni sull’Italia, in particolare l’eterno duello Roma-Lazio, Dr. Claus Beisbart und Dominique Gobert insbesondere für die Durchsicht der Arbeit, sowie Prof. Uli Schollwöck, Dr. Frank Wilhelm, Corinna Kollath, Hans Aschauer, Robert Raussendorf und Richard Neher für freundliche Unterstützung.

Ich möchte mich bei Eva Weig (née Höhberger), Florian Beil, Prof. Robert Blick, Laura Pescini und Dr. Bert Lorenz, den Kollegen aus der Experimentalphysik, für interessante Diskussionen betreffend experimenteller Aspekte der Arbeit bedanken, ebenfalls bei Prof. Jörg Kotthaus, dem dortigen Lehrstuhlinhaber, Gastgeber mehrerer Venedig/Mauterndorf-Tagungen des Münchner *Center for Nanoscience* und Senior Member unseres Ski-Teams in Mauterndorf.

Allen Okulatjen danke ich für die tollen Fußballspiele und die Erhaltung meiner körperlichen Fitness.

Mein liebster Dank geht an meine Freundin Lucianna, deren Familie sowie an meine Eltern und Brüder für deren Unterstützung während der letzten Jahre.

Lebenslauf

Patrick Matthias Werner

17. Januar 1973 Geburt in München
- 1979-1983 Grundschule “Tagesheimschule an der Hochstraße” in München
- 1983-1992 Gymnasium “Humanistischen Wilhelmsgymnasium München”
- Juli 1992 Abitur
- 1992-1993 Zivildienst beim Mobilen Sozialen Hilfsdienst, Rotes Kreuz, München
- 1993-1999 Physikstudium an Ludwig-Maximilians-Universität München
- 1996-1997 Auslandsjahr an “Université de Provence” in Marseille
- Juli 1997 Maitrise de Physique
- 1999-2000 Diplomarbeit bei Prof. C. Di Castro, “ Università La Sapienza”,
in Rom, fernbetreut durch Prof. Dr. W. Zwerger, zum Thema:
*One-particle properties of electrons interacting via
quasi-critical charge and spin fluctuations*
- Januar 2000 Diplom
- 2000-2003 Wissenschaftlicher Angestellter an der
Ludwig-Maximilians-Universität München