

MASTERARBEIT

VORGELEGT VON

Johannes $\operatorname{Hackmann}^1$

Chebyshev-Polynomentwicklung zur Behandlung von Dephasierung im Zentralspinmodell

> Gutachter: Prof. Dr. Frithjof Anders Prof. Dr. Joachim Stolze

Technische Universität Dortmund Fakultät Physik Lehrstuhl für Theoretische Physik II

September 2012

 $^{^1}$ johannes.hackmann@tu-dortmund.de

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	1
2	Exp 2.1 2.2	erimenteller Hintergrund Wachstum und Eigenschaften von Halbleiterquantenpunkten Optische Kontrolle von Spins in Halbleiterquantenpunkten	3 3 5
3	Мо	dellierung des Systems	7
	3.1	Das Zentralspinmodell	7
	3.2	Anmerkungen zur Behandlung des Modells	8
		3.2.1 Zeitskala des Systems	9
4	Die	Chebyshev Polynomentwicklung 1	3
	4.1	Definition und Eigenschaften	3
	4.2	Propagation eines physikalischen Zustands	4
		4.2.1 Abschätzen des Eigenwertspektrums	5
		4.2.2 Konvergenz der Chebyshev-Entwicklung 1	5
	4.3	Berechnung von Erwartungswerten	6
	4.4	Frequenzspektren	8
		4.4.1 Effiziente Integrationsmethode	9
		4.4.2 Die Kern-Polynom-Methode	0
5	Vorl	bereitende Betrachtung eines Zweispinmodells 2	3
	5.1	Analytische Lösung	3
	5.2	Diskussion der Numerik	5
6	Exa	kte Lösung für einheitliche Konnlungskonstanten 2	7
U	6.1	Analytische Behandlung 2	• 7
	6.2	Numerische Untersuchung beliebiger Konfigurationen	9
7	Beli	ebige Kopplungen ohne äußeres Magnetfeld 3	5
•	7.1	Selbstmittelung	5
	7.2	Kurzzeitentwicklung	6
	7.3	Mean-Field-Lösung	7
		7.3.1 Einfluss der Kopplungskonstanten	9
		7.3.2 Vergleich der Numerik mit der MF-Betrachtung	1
		7.3.3 Dynamik der Badspins	2
		7.3.4 Heisenbergsche Bewegungsgleichung	4

		7.3.5 Numerische Umsetzung der MF-Näherung	47		
	7.4	Frequenzspektrum	48		
8 Dynamik im externen Magnetfeld					
	8.1	Starkes äußeres Feld	51		
		8.1.1 Wirksamkeit der MF-Betrachtung	54		
	8.2	Geringe Magnetfeldstärke	55		
		8.2.1 Wirksamkeit der MF-Betrachtung	58		
	8.3	Frequenzspektrum	58		
9	Fazit	t und Ausblick	61		
Qu	Quellenverzeichnis				
Da	Danksagung				
Eic	Eidesstattliche Erklärung				

1 Einleitung

Wie aus dem Titel bereits hervorgeht, beschäftigt sich diese Arbeit mit der zeitabhängigen Dynamik innerhalb des sogenannten Zentralspinmodells (auch Gaudin-Modell genannt [1]). Dies ist ein recht allgemein gehaltenes Modell und es kann zur Beschreibung verschiedener physikalischer Systeme verwendet werden, wie beispielsweise von NV-Zentren in Diamant [2] oder eines einzelnen Elektrons in einem Halbleiterquantenpunkt (HLQP). Wir sind im Rahmen dieser Arbeit an letzterem Problem interessiert, bei dem die Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Elektronspin und den Spins der ihn umgebenen Kerne in Form eines Zentralspinmodells beschrieben wird. Zudem beinhaltet dieses Modell auch den Einfluss eines externen Magnetfelds.

Das Interesse an dieser Problematik ist durch die Quanteninformationsverarbeitung (QIV) motiviert, da vielversprechende Ansätze existieren QI mit Hilfe von Elektronspins in HLQPen zu speichern [3] [4]. Die eingelesene Information geht jedoch durch verschiedene Prozesse mit der Zeit verloren, von denen die durch die Hyperfeinwechselwirkung hervorgerufene Spindephasierung zu den wichtigsten zählt [5]. In dieser Arbeit soll daher ein Verständnis gewonnen werden, wie genau die Dephasierung eines einzelnen Elektrons in einem einzelnen HLQP aussieht und funktioniert.

Das Zentralspinmodell ist mittels Bethe-Ansatz integrabel [6], jedoch ist seine Lösung für den konkreten Fall beliebig kompliziert. Daher existieren verschiedene Ansätze zu seiner Behandlung. Beispielsweise eignet sich für den Fall eines starken externen Magnetfelds eine störungstheoretische Herangehensweise, welche jedoch ohne ein großes äußeres Feld versagt [7]. Zudem existieren verschiedene Herangehensweisen zur analytischen Behandlung des Modells, die sich jedoch in der Regel lediglich auf bestimmte Konfigurationen oder Anfangsbedingungen beziehen [8] [9] [10]. Beschränkt man sich hingegen auf ein endliches System, so bieten sich verschiedene numerische Methoden an. Zunächst ist in diesem Zusammenhang die exakte Diagonalisierung zu nennen [11], welche offenbar exakte Resultate liefert, jedoch nur für sehr kleine Systeme anwendbar ist. Um wesentlich größere Systeme zu bearbeiten bieten sich Trunkierungsmethoden an, die nicht den gesamten Fockraum des Systems abspeichern, sondern sich auf Unterräume beschränken. Beispielsweise sind die Behandlung mittels der zeitabhängigen Dichtematrix-Renormalisierungsgruppe (tDMRG) oder der Numerischen Renormierungsgruppe (TD-NRG) denkbar. Letztere wurde noch nicht auf das hier betrachete System angewandt und ihre Brauchbarkeit für diese Problematik ist derzeit noch unklar. Die Anwengund der tDMRG auf das Zentralspinmodell wird derzeit von D. Stanek an der TU-Dortmund ausgearbeitet. Der große Vorteil dieser Methode ist die Erreichbarkeit verhältnismäßig großer Systeme (O(100) Spins), jedoch sind die berechenbaren Zeiträume und zugänglichen Anfangsbedingungen relativ beschränkt. J. Jäger hat voriges Jahr im Rahmen ihrer Diplomarbeit [12] eine weitere Trunkierungsmethode bearbeitet, der die Heisenbergsche Bewegungsgleichung zu Grunde liegt. Bei dieser Herangehensweise stellten sich die auftretenden Trunkierungsfehler jedoch als gravierend heraus.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Behandlung der zeitabhängigen Dynamik im Zentralspinmodell mittels der Chebyshev-Polynomentwicklung [13]. Dies ist eine Methode, die den gesamten Fockraum des Systems abspeichert, somit frei von Trunkierungsfehlern ist und, bis auf unvermeidbare Fehler durch die begrenzte Genauigkeit des Computers, exakte Resultate liefert. Im Vergleich zur exakten Diagonalisierung bietet die Chebyshev-Entwicklung vor allem den Vorteil größere Systeme zugänglich zu machen. Darüber hinaus besteht durch sie die Möglichkeit beliebige Anfangsbedingungen einfließen zu lassen, was eines der wesentlichen Probleme analytischer Ansätze darstellt.

Insgesamt besteht das Ziel dieser Arbeit darin ein Verständnis zu gewinnen, wie sich die Hyperfeinwechselwirkung in HLQPen auf die Dynamik polarisierter Elektronspins auswirkt. Zu diesem Zweck werden zunächst die genaue Systemmodellierung in Form eines Zentralspin von einigen (~ 20) Kernspins umgeben ist, und grundlegende Eigenschaften des Modells angesprochen. Dann wird die Funktionsweise der Chebyshev-Polynomentwicklung zur Propagation physikalischer Zustände erklärt, sowie eine direkte Methode zur Berechnung der Frequenzspektren zeitabhängiger Größen vorgestellt und an einem Toy-Modell getestet. Daraufhin wird zunächst eine identische Kopplung des Elektrons an jeden der Kerne angenommen und für diesen Fall eine exakte Lösung der Zeitentwicklung angegeben und diskutiert. Anschließend wird studiert, welchen Effekt die Hyperfeinwechselwirkung in realistischen HLQPen hat. Dazu werden die Ergebnisse auf ihre Abhängigkeit von der Systemgröße hin analysiert. In diesem Zusammenhang wird auch ein analytisches, Mean-Field-artiges Resultat für ein unendlich großes System ohne äußeres Magentfeld vorgestellt, dessen Übereinstimmung mit den numerischen Daten untersucht werden wird. Zudem wird die Übertragbarkeit dieser analytischen Herangehensweise auf den magnetfeldbehafteten Fall diskutiert.

Es sei an dieser Stelle noch darauf hingewiesen, dass während der gesamten Arbeit natürliche Einheiten ($\hbar = c = 1$) verwendet werden.

2 Experimenteller Hintergrund

Wie in der Einleitung bereits erwähnt wurde, existieren Ansätze um QIV auf Basis von HLQPen zu betreiben. Um dies jedoch tatsächlich zu realisieren ist die umfassende Erforschung der Physik von HLQPen von Nöten, wozu diverse experimentelle und theoretische Arbeiten existieren. In diesem Kapitel sollen kurz eine Methode zur Erzeugung von HLQPen beschrieben und wesentliche Eigenschaften der QPe angegeben werden. Zudem sollen auch grundlegende experimentelle Ansätze angesprochen werden, welche die Betrachtung von Spindephasierung in HLQPen möglich machen.

2.1 Wachstum und Eigenschaften von Halbleiterquantenpunkten

Es existieren verschiedene Methoden zur Erzeugung von QPen im Allgemeinen. An der TU-Dortmund werden speziell selbstorganisierte Ensembles von HLQPen untersucht, welche durch Molekularstrahlepitaxie (MBE = molecular beam epitaxy) hergestellt werden [14]. An dieser Stelle soll der Herstellungsprozess an dem konkreten Beispiel von InAs/GaAs-QPen illustriert werden, wobei die Stranski-Krastanow-Methode verwendet wird [15]. Die Bezeichnung InAs/GaAs meint, dass die resultierenden QPe aus InAs bestehen, welche auf einem GaAs-Substrat gewachsen sind. Der Herstellungsprozess findet im Ultrahochvakuum statt. Dabei werden die Stoffe In und As erhitzt bis sie verdampfen und so fokussiert, dass sie einen Strahl ergeben, welcher dann auf das leicht erhitzte GaAs-Substrat trifft. Da die Gitterkonstanten von GaAs und InAs sich



Abbildung 2.1: (l.) STM-Aufnahme eines einzelnen InAs-Quantenpunkts [16]. (r.) Mittels eines TEM gewonnene Aufnahme eines selbstorganisierten QP-Ensembles vom MPI in Halle.

nur um etwa 7 % unterscheiden [17], bildet sich auf dem Substrat zunächst eine Monolage InAs mit der Gitterkonstante von GaAs. Nach und nach kommen weitere Monolagen hinzu, deren Gitterkonstante jedoch gegen die eigentliche von InAs strebt, sodass im Material Verspannungen auftreten. Aufgrund dieser Verspannungen wächst nach wenigen Monolagen keine gleichmäßige Oberfläche InAs auf, sondern es entstehen viele kleine Inseln, die QPe. Abbildung 2.1 zeigt beispielhaft eine Rastertunnelmikroskopaufnahme (STM = scanning tunneling microscope) eines typischen HLQPs und eine Transmissionselektronmikroskopaufnahme (TEM) eines QP-Ensembles, welche mittels MBE erzeugt wurden. Es sei noch angemerkt, dass nach dem Entstehen der InAs-QPe noch eine Schicht GaAs über die Probe gewachsen wird, sodass das InAs beidseitig von GaAs eingeschlossen ist.

Die Bandstrukturen von GaAs und InAs haben eine sehr ähnliche Gestalt, welche in der Nähe der Bandlücke schematisch in Abbildung 2.2 gezeigt ist, allerdings ist die Bandlücke von GaAs etwa 30% größer als die von InAs, sodass die von GaAs umschlossenen InAs-QPe innerhalb der Probe einen dreidimensionalen Potentialtopf bilden. Somit können Elektronen innerhalb der HLQPe lokalisiert werden, wo sie lediglich



Abbildung 2.2: (l.) Schematische Darstellung der Bandstrukturen von GaAs und InAs, Abbildung übernommen aus [18]. (r.) Der resultierende Potentialtopf im HLQP. vb bezeichnet das Valenzband und cb das Leitungsband. Gezeigt sind lediglich die hier relevanten Energieniveaus.

einige diskrete Energiewerte annehmen können. Aus diesem Grund spricht man bei QPen auch häufig von künstlichen Atomen. Neben der Lokalisierung der Elektronen, bewirkt der Einschluss in den HLQPen auch, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkung, welche in Volumenhalbleitern die dominante Rolle spielt, stark unterdrückt wird und andere Effekte, wie die Hyperfeinwechselwirkung, in den Vordergrund treten.

2.2 Optische Kontrolle von Spins in Halbleiterquantenpunkten

Zum Zweck der QIV möchte man Informationen auf den Spins von Elektronen innerhalb der HLQPe speichern. Um dies jedoch für die Praxis nutzbar zu machen, ist es von Nöten gewisse Kohärenzzeiten zu erreichen, um eine große Anzahl von Operationen durchführen zu können ohne die gespeicherte Information zu verlieren. Da die notwendige Kohärenzzeit von Elektronspins in HLQPen von Natur aus nicht hinreichend lang ist, ist es wichtig ein genaues Verständnis über die auftretende Spindephasierung zu gewinnen. Dazu werden häufig Pump-Probe-Experimente durchgeführt, bei denen ein erster Laserpuls (Der Pump-Puls) verwendet wird, um in einem QP-Ensemble eine Spinpolarisation zu erzeugen und ein zweiter, nach einer einstellbaren Verzögerung auftreffender Puls (Der Probe-Puls), der die noch vorhandene Polarisation wahlweise aufgrund des Kerr- oder Farraday-Effekts messbar macht [19]. Abbildung 2.3



Abbildung 2.3: Grundlegender Aufbau eines Pump-Probe-Experiments in Voigt Geometrie. Abbildung übernommen von der Webseite des Lehrstuhls für experimentelle Physik 2 der TU-Dortmund [20].

zeigt den grundlegenden Aufbau eines solchen Pump-Probe-Experiments in der sogenannten Voigt Geometrie. Diese meint, dass die parallel zur Ausbreitungsrichtung (im Folgenden z-Richtung) des Pump-Strahls polarisierten Elektronenspins einem externen Magnetfeld in x-Richtung ausgesetzt sind. Dieses Feld bewirkt, dass sämtliche Spins eine Larmorpräzession um die x-Achse durchführen, sodass ein kohärenter Anteil in der Gesamtdynamik des Systems entsteht. Misst man die Spinpolarisation entlang der z-Achse ist somit eine Oszillation zu erkennen, in deren Abklingen sich die auftretende Dephasierung äußert. In der Abbildung wird zur Detektion der vorhandenen Spinpolarisation der Farraday-Effekt angedeutet, weshalb der Probe-Strahl auch linear polarisiert sein sollte. Die zirkulare Polarisation des Pump-Strahls hingegen ist notwendig, um überhaupt eine Spinpolarisation in der Probe zu erzeugen. Es wird typischerweise ein Pump-Laser verwendet, dessen Energie zu gering ist, um Anregungen aus dem abgespaltenen Split-off-Band (siehe Abbildung 2.2) zu erlauben, weshalb effektiv ein 6-Niveau System vorliegt. Dieses besteht aus dem Leitungs-, dem Leichtloch- und dem Schwerlochband. In den ersten beiden Bändern tragen die Teilchen den Spin $j_z = \pm \frac{1}{2}$, in letzterem ist dagegen $j_z = \pm \frac{3}{2}$. Zirkular polarisiertes Licht trägt je nach Polarisationsrichtung den Drehimpuls +1 (rechtszirkular) oder -1 (linkszirkular). Somit sind die in Abbildung 2.4 gezeigten Anregungen möglich. Da Übergänge aus dem Schwerlochband im mittel 3-mal häufiger auftreten als aus dem Leichtlochband, kann insgesamt eine Spinpolarisation von maximal 50 % erreicht werden. Zudem zeigt sich, dass linkszirkular polarisiertes Licht immer eine Spinpolarisation parallel und rechtszirkulares Licht antiparallel zur Ausbreitungsrichtung bewirkt. Somit haben wir gesehen, wie eine Spinpolarisation innerhalb eines Ensembles von HLQPen erzeugen und ihr Zerfall gemessen werden kann. Dieses Verfahren bildet die Grundlage der Messungen, welche die vorliegende Arbeit motivieren, da auf diese Weise die Hyperfeinwechselwirkung als entscheidende Ursache der Spindephasierung ausgemacht werden konnte.



Abbildung 2.4: Das effektive 6-Niveausystem, welches bei der optischen Anregung von Elektronenspins in HLQPen zu Grunde liegt. σ^+ gibt rechts- und σ^- linkszirkulares Licht an. Zudem ist die relative Häufigkeit der Übergänge angegeben. Die Abbildung ist aus [19] übernommen.

3 Modellierung des Systems

Wie im vorigen Kapitel beschrieben, gilt das Interesse dieser Arbeit einem Versuchsaufbau, bei dem im wesentlichen Elektronen (oder Löcher) in Ensembles von QPen optisch angeregt werden und daraufhin die Zeitentwicklung der induzierten Polarisation beobachtet wird. Bei diesem Prozess spielen verschiedene Faktoren eine Rolle, wie zum Beispiel die Hyperfein-Fermi-Kontakt-Wechslwirkung [21], die Spin-Bahn-Kopplung oder die Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Während erstere bereits auf kürzesten Zeitskalen zur Geltung kommt, gewinnen letztere erst ab etwa 10^{-3} s an Relevanz [22], sodass für den initialen Polarisationszerfall die Fermi-Kontakt-Wechselwirkung die entscheidende Rolle spielt. Aus diesem Grund beschränkt sich die vorliegende Arbeit auf die Betrachtung eben dieser.

3.1 Das Zentralspinmodell

Der Ausgangshamiltonoperator

$$H_{kontakt} = \frac{16\pi\mu_B}{3} \sum_k \frac{\mu_k}{I_k} \left(\vec{S} \cdot \vec{I}_k\right) \delta(\vec{r} - \vec{R}_k) \tag{3.1}$$

dient unter anderem der Beschreibung eines einzelnen QPs, in dem ein einzelnes angeregtes Elektron (oder Loch) mittels der genannten Wechselwirkung mit den Kernspins interagiert [9][23]. Die auftauchende Summe läuft dabei über sämtliche Gitterplätze. Die Operatoren \vec{S} und \vec{I}_k bezeichnen die Drehimpulsoperatoren des Elektrons und der jeweiligen Kerne. \vec{r} ist die Position des Elektrons und μ_B das Bohrsche Magneton und analog sind \vec{R}_k und μ_k die Position und das magnetische Moment der Kerne. Da der Abstand zweier Energieniveaus eines lokalisierten Elektrons wesentlich größer ist, als die Energie der Hyperfein-Wechselwirkung, lässt sich dieser Hamiltonoperator mittels Störungstheorie erster Ordnung auf die Form

$$H_{\rm hf} = \sum_{k} A_k \vec{S} \cdot \vec{I}_k \tag{3.2}$$

$$A_k = \frac{16\pi\mu_B\mu_k}{3I}|\psi_e(\vec{R}_k)|^2$$
(3.3)

bringen, worin bereits eine Beschränkung der Elektronenwellenfunktion auf das s-Orbital stattgefunden hat, sodass das magnetische Moment \vec{S} des Elektrons lediglich durch seinen Spin gegeben ist. $\psi_e(\vec{R}_k)$ ist hier die Elektronwellenfunktion am Ort des jeweiligen Kernspins, deren Betrag durch I gegeben ist. Der Hamiltonoperator $H_{\rm hf}$ bildet den Hyperfeinwechselwirkungsanteil des hier betrachteten Zentralspinmodells, welches in

allgemeiner Form erstmals 1976 von Gaudin angegeben wurde [1]. Der Name dieses Modells ist intuitiv sofort verständlich, da es aus einer Vielzahl von Badspins besteht, welche an ein Magnetfeld koppeln, das lediglich von einem einzelnen magnetischen Moment, nämlich dem Spin des Elektrons, herrührt. Gleichzeitig wechselwirken die Kernspins nicht miteinander. Für Elektronen in einem Halbleiter ist in (3.3) noch zu berücksichtigen, dass sich die Wellenfunktion $\psi_e(\vec{r})$ nach dem Bloch-Theorem aus der Blochamplitude $u(\vec{r})$ und einer modulierenden Einhüllenden $\psi(\vec{r})$ zusammensetzt. Für freie Elektronen wäre $|u(\vec{R}_k)|^2 = 1$, allerdings ergibt sich hier für realistische Kristalle ein Faktor η , der in Halbleitern in der Regel von der Größenordnung 10³ ist [8]. Der bis hierher diskutierte Hamiltonoperator (3.2) beschreibt ein in sich geschlossenes System, in dem magnetische Momente miteinander wechselwirken. Wie aber im vorigen Kapitel angesprochen, werden die QPe in den meisten Fällen zusätzlich einem äußeren Magnetfeld \vec{B} ausgesetzt, welches die Dynamik des Systems signifikant beeinflusst. Aufgrund der geringen Zeeman-Energie der Kerne gegenüber dem Elektron, wird hier die Kopplung der Kernspins an das Magnetfeld vernachlässigt und der gesamte Hamiltonoperator lautet

$$H = g_e \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B} + \sum_k A_k \vec{S} \cdot \vec{I}_k, \qquad (3.4)$$

worin g_e das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons bezeichnet. Dies ist der vollständige Hamiltonoperator, welcher im Rahmen dieser Arbeit untersucht wird.

3.2 Anmerkungen zur Behandlung des Modells

Es sei zunächst erneut darauf hingewiesen, dass das Zentralspinmodell mittels Bethe-Ansatz integrabel ist [6]. Jedoch ist das analytische Lösen des Modells in der Praxis sehr aufwändig und lässt in der Regel nur Beschränkungen auf bestimmte Anfangsbedingungen zu, sodass eine exakte Behandlung von Problemen mit beliebig komplizierten Anfangsbedingungen unverhältnismäßig hohen Aufwand erfordern würde. Daher lohnt es sich numerische Konzepte zu entwickeln, die einen schnellen Zugang zum Berechnen der Systemdynamik bei beliebigen Randbedingungen bieten. Hierbei stellt sich vor allem die Herausforderung, dass der Hilbertraum des Systems exponentiell mit der Anzahl der berücksichtigten Spins anwächst, was bei ca. 10^5 Kernspins in einem HLQP offensichtlich nicht ohne weiteres numerisch behandelbar ist. Daher wird hier lediglich ein kleines Teilsystem des QPs mit N Badspins herausgegriffen, sodass der Hamiltonoperator die Form

$$H = g_e \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B} + \sum_{k=1}^N A_k \vec{S} \cdot \vec{I}_k$$
(3.5)

annimmt. Um möglichst viele Kernspins in die Rechnungen einzubeziehen, beschränken wir uns im Folgenden auf Kernspins des Betrags $I = \frac{1}{2}$, sodass der gesamte Hilbertraum

 $D=2^{N+1}$ Freiheitsgrade aufweist, da ein einzelner Spin- $\frac{1}{2}$ gerade in einem 2 dimensionalen Hilbertraum lebt. Im Folgenden wird zur Beschreibung eines Spins immer die Basis der Eigenzustände des Operators $S^z=\frac{1}{2}\sigma^z$ verwendet, wobei σ^z eine der drei Paulimatrizen

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(3.6)

bezeichnet. Die Eigenwertgleichungen für σ^z und die damit zusammenhängende Wahl der Basiszustände lauten

$$\sigma^{z} \left| 0 \right\rangle = - \left| 0 \right\rangle, \qquad \left| 0 \right\rangle \stackrel{\circ}{=} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$$

$$(3.7)$$

$$\sigma^{z} \left| 1 \right\rangle = + \left| 1 \right\rangle, \qquad \left| 1 \right\rangle \stackrel{\circ}{=} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Da es üblich ist die Eigenzustände $|1\rangle$ und $|0\rangle$ als Spin "up" und "down" zu bezeichnen, wird für sie auch die Darstellung $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ verwendet, was insbesondere eine intuitive Schreibweise für Mehrspinzustände wie z.B. $|\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle$ ermöglicht, wo eine Durchnumerierung aller Basiszustände schnell unübersichtlich wird. Im Zentralspinmodell sind prinzipiell alle Kernspins, bis auf ihre variierende Kopplungskonstante A_k , gleichberechtigt und es nimmt lediglich der zentrale Spin eine Sonderrolle ein, daher wird letzterer fortan in allen explizit angegebenen Zuständen durch einen Doppelpfeil hervorgehoben (z.B. $|\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle$). An dieser Stelle sei auf die wichtige Eigenschaft des Operators (3.2) hingewiesen, dass er die Gesamtpolarisation $S_{ges}^z = \frac{N+1}{2} - M$ erhält, wobei M die Anzahl der gegenüber dem Zustand $|\uparrow,\uparrow,\cdots,\uparrow\rangle$ geflippten Spins angibt.

3.2.1 Zeitskala des Systems

Da wir bei den später folgenden, numerischen Simulationen insbesondere an der Zeitentwicklung des Systems interessiert sind, stellt sich die Frage nach einer wohldefinierten Zeitskala für das System. Es bieten sich auf den ersten Blick zwei Varianten an um diese für den Hamiltonoperator (3.5) festzulegen. Entweder man dividiert den gesamten Operator durch die Larmorfrequenz $\omega_L = g_e \mu_B |\vec{B}|$, was die Zeitskala $t \cdot \omega_l$ ergäbe, oder man verwendet dazu $A = \sum_{k=1}^{N} A_k$, und es ergibt sich

$$\tau := t \cdot A. \tag{3.9}$$

Da der Großteil der späteren Betrachtungen den magnetfeldfreien Fall behandelt, wird hier zunächst letztere Variante gewählt und der neue dimensionslose Hamiltonoperator lautet somit

$$\tilde{H}_1 = \frac{g_e \mu_B}{A} \vec{B} \cdot \vec{S} + \sum_{k=1}^N \frac{A_k}{A} \vec{S} \cdot \vec{I}_k, \qquad (3.10)$$

sodass allen Messungen die dimensionslose Zeiteinheit τ zu Grunde gelegt werden kann. Neben dieser sehr intuitiven Wahl soll hier noch eine systematischere Option vorgestellt werden. Dazu besinnen wir uns zunächst darauf, dass eine bestimmte Systemkonfiguration im Allgemeinen durch einen Dichteoperator ρ beschrieben werden kann. Die Zeitentwicklung dieses Operators ist durch die von-Neumann-Gleichung gegeben, sie lautet

$$\partial_t \rho = -i[H,\rho] \tag{3.11}$$

$$\implies \rho(t) = e^{-iHt} \rho_0 e^{iHt}, \qquad (3.12)$$

wobei ρ_0 das System zum Zeitpunkt t = 0 charakterisiert. Die Grundidee besteht nun darin eine Zeitskala zu finden, die für kurze Zeiträume die Dynamik des Zentralspins invariant lässt. Zu diesem Zweck werden die Exponentialfunktionen in (3.12) durch ihre Reihendarstellung ersetzt und bis zur zweiten Ordnung in t ausmultipliziert, es ergibt sich

$$\rho(t) = \rho_0 - i[H,\rho_0]t - \frac{1}{2} \left[H,[H,\rho_0]\right]t^2 + O(t^3).$$
(3.13)

Wir wollen nun konkret die Entwicklung der Polarisation in z-Richtung eines Zentralspins betrachten, der sich für t = 0 im Zustand $|\Uparrow\rangle$ befindet, während über die Badspins keinerlei Information vorliegt. Diese Ausgangskonfiguration wird durch den Dichteoperator

$$\rho_0 = \frac{2}{D} \sum_{i=1}^{D/2} |i\rangle \langle i| = \frac{1}{D} (\underline{1} + 2S^z)$$
(3.14)

beschrieben, wobei das Bad hier in Form eines statistischen Gemischs [24] vorliegt. Somit erhalten wir für die gesuchte Zeitentwicklung

$$\langle S^{z}(t) \rangle = \operatorname{Tr}\left[\rho(t)S^{z}\right] = \operatorname{Tr}\left[(\rho_{0} - i[H,\rho_{0}]t - \frac{1}{2}[H,[H,\rho_{0}]]t^{2})S^{z}\right] + O(t^{3})$$
(3.15)

$$= \frac{1}{2} - \frac{i}{D} \operatorname{Tr} \left[\sum_{k} A_k (S^y I_k^y + S^x I_k^x) t \right] - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left[[H, [H, \rho_0]] S^z t^2 \right] + O(t^3), \quad (3.16)$$

wobei $\operatorname{Tr}[\cdots]$ die Spurbildung bezeichnet. Der zweite Term in (3.16) fällt weg, da alle auftretenden Operatoren spurlos sind. Es bleibt also lediglich die Beiträge von $[H,[H,\rho_0]]S^z$ zu berechnen. Dieser Term liefert insgesamt 6 Beiträge, die sich zu $(i,j \in [x,y,z])$

$$-i\sum_{k,k'} A_k A_{k'} \left[S^i I^i_{k'}, S^y I^x_k \right] S^z = -\sum_{k,k'} A_k A_{k'} \left(S^i S^y \delta_{k,k'} \epsilon_{xij} I^j_k + \epsilon_{iyj} S^j I^i_{k'} I^x_k \right) S^z \quad (3.17)$$
$$i\sum_{k,k'} A_k A_{k'} \left[S^i I^i_{k'}, S^x I^y_k \right] S^z = -\sum_{k,k'} A_k A_{k'} \left(S^i S^x \delta_{k,k'} \epsilon_{iyj} I^j_k + \epsilon_{xij} S^j I^i_{k'} I^y_k \right) S^z \quad (3.18)$$

10

zusammenfassen lassen. Die jeweils ersten Terme der rechten Seite tragen unter der Spurbildung in (3.16) nicht bei, da sie ein einzelnes I_k^j enthalten, welches für beliebige Kombinationen von Zentralspinoperatoren S die Spurlosigkeit des gesamten Terms sichert. Die übrigen Terme sind genau dann nicht spurlos, wenn j = z, k = k', sowie im ersten Fall i = x und im zweiten i = y gilt. Es bleiben also genau zwei Beiträge und wir erhalten

$$\langle S^{z}(t) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{8D} \sum_{k} A_{k}^{2} \operatorname{Tr} \left[\underline{1} \right] t^{2} + O(t^{3})$$
 (3.19)

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \sum_{k} A_{k}^{2} t^{2} + O(t^{3}) =: \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{t}{T^{*}}\right)^{2} + O(t^{3}).$$
(3.20)

Hier wurde die Zeitkonstante $T^*=\sqrt{\sum_k A_k^2}^{-1}$ eingeführt. Mit dieser kann man nun erneut einen dimensionslosen Hamiltonoperator

$$\tilde{H}_2 = T^* g_e \mu_B \vec{B} \cdot \vec{S} + T^* \sum_{k=1}^N A_k \vec{S} \cdot \vec{I}_k.$$
(3.21)

einführen, unter Verwendung dessen das Kurzzeitverhalten von $\langle S^z \rangle$ unabhängig von der genauen Realisierung der Kopplungskonstanten A_k und somit vor allem auch unabhängig von der Systemgröße sein sollte. Im Folgenden werden sowohl (3.10) als auch (3.21) Verwendung finden und deren Einfluss, insbesondere auf das Kurzzeiverhalten, gegenüber gestellt.

4 Die Chebyshev Polynomentwicklung

Im folgenden Kapitel wird die Chebyshev-Polynomentwicklung vorgestellt, welche die Basis der numerischen Simulationen dieser Arbeit bildet. Unser Interesse gilt dabei der Zeitentwicklung innerhalb des, im vorigen Kapitel vorgestellten, Zentralspinmodells. Zu lösen ist dazu die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\partial_t \left| \psi \right\rangle = H \left| \psi \right\rangle, \tag{4.1}$$

worin $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand des Systems ist. Formal lässt sich die Schrödingergleichung durch Einführen des Zeitentwicklungsoperators lösen:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(t=0)\rangle = e^{-iHt} |\psi_0\rangle.$$
(4.2)

Diese Lösung bringt in der Praxis zunächst keinen wirklichen Mehrwert gegenüber der konventionellen Formulierung der Schrödingergleichung, jedoch lässt sich die Chebyshev-Polynomentwicklung auf den Zeitentwicklungsoperator anwenden, um so eine geeignete Grundlage zur numerischen Propagation des Zustands $|\psi(t)\rangle$ zu gewinnen [13][25]. Im Folgenden werden zunächst wichtige grundlegende Eigenschaften der Chebyshev-Polynome genannt und beschrieben wie der Zeitentwicklungsoperator mit Hilfe der Chebyshev-Entwicklung geschrieben werden kann. Darüber hinaus wird eine Methode zur direkten Berechnung des Frequenzspektrums der zeitentwickelten Größen angegeben. Zusätzlich dient dieses Kapitel der Behandlung der wesentlichen numerischen Details, die zur erfolgreichen Durchführung der Simulationen zu beachten sind.

4.1 Definition und Eigenschaften

Es exisiteren mehrere verschiedene Definitionen der Chebyshev-Polynome erster Art $T_n(z)$, von denen hier lediglich zwei angegeben werden. Zum einen sind sie rekursiv über

$$T_0(z) = 1, T_1(z) = z, T_{n+1}(z) = 2zT_n(z) - T_{n-1}(z) (4.3)$$

definiert, zum anderen besteht die direkte Darstellung

$$T_n(z) = \begin{cases} \cos(n \cdot \arccos(z)), & z \in [-1,1]\\ \cosh(n \cdot \operatorname{arcosh}(z)), & \text{sonst.} \end{cases}$$
(4.4)

Auf dem Intervall $z \in [-1,1]$ bilden die Chebyshev-Polynome erster Art eine orthogonale Basis, deren Orthogonalitätsrelation

$$\langle T_n | T_m \rangle = \int_{-1}^1 \mathrm{d}z \, \frac{T_n(z)T_m(z)}{\sqrt{1-z^2}} = \frac{\pi}{2-\delta_{n,0}} \delta_{n,m}$$
(4.5)

lautet, worin $\delta_{n,m}$ das Kroneckersymbol ist [26]. Somit lässt sich jede auf dem genannten Intervall definierte Funktion g(z) in der Basis dieser Polynome entwickeln und auf diese Weise in der Form

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n T_n(z),$$

$$b_n = \frac{2 - \delta_{n,0}}{\pi} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \, \frac{g^*(x) T_n(x)}{\sqrt{1 - x^2}}$$
(4.6)

schreiben. Eine weitere im Folgenden bedeutende Eigenschaft ist, dass die Chebyshev-Polynome erster Art über ihre Fourier-Transformation mit den Besselfunktionen erster Art $J_n(\omega)$ verknüpft sind:

$$J_n(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \,\mathrm{e}^{-i\omega t} J_n(t) = \frac{2(-i)^n T_n(\omega)}{\sqrt{1-\omega^2}}.$$
(4.7)

4.2 Propagation eines physikalischen Zustands

Um nun die Chebyshev-Polynomentwicklung auf den Zeitentwicklungsoperator e^{-iHt} anzuwenden, muss der Hamiltonoperator H, dessen Eigenwertspektrum $E_{min} \leq \omega \leq E_{max}$ erfülle, so transformiert werden, dass die Eigenwerte auf das Intervall [-1,1]abgebildet werden. Zu diesem Zweck definiert man die Größen

$$\alpha = \frac{E_{max} + E_{min}}{2}, \quad \beta = \frac{E_{max} - E_{min}}{2},$$

sodass sich der dimensionslose transformierte Hamiltonoperator

$$H' = \frac{H - \alpha}{\beta} \quad \Longleftrightarrow \quad H = \beta H' + \alpha \tag{4.8}$$

ergibt, dessen Eigenwertspektrum $-1 \leq \omega' \leq 1$ erfüllt. Som
it kann die Zeitentwicklung des Zustands $|\psi(t)\rangle$ mittels der Che
byshev-Polynomentwicklung berechnet werden und es ergibt sich

$$e^{-iHt} |\psi_0\rangle = e^{-i\alpha t} e^{-iH'\beta t} |\psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} b_n(t) T_n(H') |\psi_0\rangle$$
(4.9)

$$b_n(t) = e^{-i\alpha t} \frac{2 - \delta_{n,0}}{\pi} \int_{-1}^1 d\omega' \, \frac{e^{i\omega'\beta t} T_n(\omega')}{\sqrt{1 - \omega'^2}} \tag{4.10}$$

$$= e^{-i\alpha t} (2 - \delta_{n,0}) i^n J_n(\beta t).$$
(4.11)

14

Die Chebyshev Entwicklung des Zeitentwicklungsoperators bewirkt demnach eine Separation der zeitlichen Dynamik vom Einfluss des Hamiltonoperators. In der Praxis ist es somit möglich vor der Durchführung der Zeitentwicklung einen Satz von Zuständen

$$|\Phi_n\rangle = T_n(H') |\psi_0\rangle \tag{4.12}$$

zu generieren und abzuspeichern, sodass der Hamiltonoperator innerhalb der Zeitentwicklung nicht mehr benötigt wird. Zur effizienten und präzisen Berechnung der Besselfunktionen wird hier ein leicht modifizierter Algorithmus aus [27] verwendet. In der Praxis stellen sich zum Berechnen der beschriebenen Entwicklung nun zwei wesentliche Fragen. Zum einen ist das Eigenwertspektrum des betrachteten Hamiltonoperators im Allgemeinen nicht bekannt, sodass die benötigten Größen E_{min} und E_{max} a priori nicht zur Verfügung stehen. Zum anderen taucht in Gleichung (4.9) eine nicht endliche Summe auf.

4.2.1 Abschätzen des Eigenwertspektrums

Während die bisherige Erläuterung der Chebyshev-Entwicklung vollständig allgemein gehalten wurde, bezieht sich dieser Abschnitt, wie auch sämtliche Resultate dieser Arbeit, lediglich auf den in Gleichung (3.5) angegebenen Hamiltonoperator. Da die darin verwendeten Kopplungskonstanten A_k strikt größer als 0 gewählt werden, wir also eine antiferromagnetische Kopplung betrachten, ist der Eigenwert E_{max} für den magnetfeldfreien Fall mindestens zweifach entartet und es können die Eigenzustände $|\phi_0\rangle = |\uparrow, \uparrow \cdots \uparrow\rangle$ und $|\phi_1\rangle = |\downarrow, \downarrow \cdots \downarrow\rangle$ abgelesen werden. Nimmt man zu den daraus resultierenden Eigenenergien des Hamiltonoperators noch ein Magnetfeld hinzu, so erhält man

$$E_{max} = \frac{\omega_L}{2} + \frac{A}{4}.\tag{4.13}$$

Die Grundzustandsenergie E_{min} ist hingegen nicht so einfach abzulesen. Wie in [8] diskutiert, wären klassisch gesehen im Grundzustand alle Badspins parallel zueinander und der Zentralspin antiparallel dazu ausgerichtet und die Grundzustandsenergie somit durch $E_{min} = -E_{max}$ gegeben. Durch Quanteneffekte ist dies jedoch nicht der Fall und es findet grundsätzlich eine Absenkung um 2α der Grundzustandsenergie gegenüber dem klassischen Wert statt. Analytisch ist diese Absenkung für beliebig große Systeme mit beliebigen A_k nicht zugänglich. Es ist jedoch offensichtlich, dass $|E_{min}| \ge |E_{max}|$ gilt und somit E_{min} der betragsmäßig größte Eigenwert des Systems ist. Daher ist es möglich die Potenzmethode zu verwenden, um E_{min} schnell zu berechnen. Für dieses Verfahren bietet es sich an als Ausgangsvektor, welcher eine endliche Projektion in den zu E_{min} gehörigen Unterraum aufweisen muss, den zuvor angeprochenen Zustand $|\phi\rangle = |\uparrow, \downarrow \cdots \downarrow\rangle$ zu verwenden.

4.2.2 Konvergenz der Chebyshev-Entwicklung

Die Konvergenz der in (4.9) auftauchenden Summe wird durch die Gestalt der Besselfunktionen hoher Ordnung gesichert. Abbildung 4.1 veranschaulicht diese Tatsache, indem $J_1(\beta t)$, $J_{10}(\beta t)$ und $J_{30}(\beta t)$ gegeneinander aufgetragen sind. Da weder die Chebyshev-Polynome, noch ein weiterer Bestandteil der Koeffizienten $b_n(t)$ für die Konvergenz der Reihe sorgen, ist somit auch klar, dass die Zahl der, für ein hinreichend genaues Ergebnis zu berücksichtigenden, Summenglieder N_c lediglich vom Argument der Besselfunktionen βt abhängen kann. Um nahezu exakte Resultate zu gewährleisten, sollen für die gesamte Arbeit alle Summenglieder berechnet werden deren Beitrag $\geq 10^{-12}$ ist. Eine Betrachtung der Besselfunktionen höherer Ordnung zeigt, dass die Wahl

$$N_c(\beta t) = 1.054 \cdot \beta t + 41 \tag{4.14}$$

diese Forderung erfüllt. Für die meisten später besprochenen Rechnungen liegt N_c in der Größenordnung O(100). Da die Zustände aus Gleichung (4.12) während der gesamten Simulation im Arbeitsspeicher abrufbar sein sollen, begrenzt insbesondere dieser die erreichbare Systemgröße. Es zeigt sich, dass eine gewöhnliche Workstation mit 12 GB Arbeitsspeicher bereits ausreicht um auf moderaten Zeitskalen Systeme mit bis zu 23 Spins zu simulieren. Da der benötigte Speicherplatz jedoch exponentiell wächst, bieten auch leistungsstarke Rechencluster nicht die Möglichkeit wesentlich größere Systeme zu berechnen.



Abbildung 4.1: Verlauf dreier Besselfunktionen aufsteigender Ordnung, zur Illustration der Konvergenz der Chebyshev-Polynomentwicklung.

4.3 Berechnung von Erwartungswerten

Im vorigen Abschnitt wurde gezeigt, dass es möglich ist, die Chebyshev-Entwicklung zu nutzen, um die zeitliche Dynamik eines Quantenzustands zu simulieren. Wir wollen uns jedoch nicht ausschließlich auf den Fall reiner Zustände beschränken, sondern beliebige Anfangsbedingungen für das System zulassen. Dazu ist das Berechnen von Erwartungswerten erforderlich, wobei die Anfangskonfiguration des Systems über den Dichte
operator ρ einfließt. Sei Onun eine beliebige Observable, dann ergibt sich der zugehörige Erwartungswert aus

$$\langle O \rangle (t) = \operatorname{Tr} \left[\rho O(t) \right]$$

= $\sum_{i=1}^{D} \langle i | \rho e^{iHt} O e^{-iHt} | i \rangle,$ (4.15)

wobei $|i\rangle$ die Basiszustände und D die Dimension des Fockraums bezeichnet. Nun lässt sich der Ausdruck $\langle i | \rho$ als neuer Zustand $\langle i' |$ auffassen und der zu berechnende Ausdruck lautet

$$\langle O \rangle (t) = \sum_{i=1}^{D} \langle i' | e^{iHt} O e^{-iHt} | i \rangle.$$
 (4.16)

Dieser Term lässt sich mittels der Chebyshev-Entwicklung prinzipiell berechnen, jedoch würde dabei die Rechenzeit proportional zur Systemgröße steigen, was im Fall eines Spinsystems, wie es hier diskutiert wird, einen exponentiellen Anstieg unter Hinzunahme weiterer Spins bedeuten würde. Um Gleichung (4.16) in moderater Rechenzeit auszuwerten, kann man sich jedoch eine stochastische Methode zur Spurbildung zu Nutze machen [28]. Dazu bestimmt man eine Anzahl R zufälliger Zustände

$$|r\rangle = \sum_{i=1}^{D} \xi_{ri} |i\rangle, \qquad (4.17)$$

wobei die reellen Koeffizienten ξ_{ri} bezüglich des statistischen Mittels $\langle \langle \cdots \rangle \rangle$ die Beziehungen

$$\langle \langle \xi_{ri} \rangle \rangle = 0, \tag{4.18}$$

$$\left\langle \left\langle \xi_{ri}\xi_{r'j}\right\rangle \right\rangle = \delta_{r,r'}\delta_{i,j} \tag{4.19}$$

erfüllen müssen. Diese werden beispielsweise durch gaußverteilte Zufallszahlen erfüllt. Betrachte nun folgendes statistisches Mittel:

$$\left\langle \left\langle \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \left\langle r' \right| e^{iHt} O e^{-iHt} \left| r \right\rangle \right\rangle \right\rangle = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^{R} \sum_{i,j=1}^{D} \left\langle \left\langle \xi_{ri} \xi_{rj} \right\rangle \right\rangle \left\langle i' \right| e^{iHt} O e^{-iHt} \left| j \right\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{D} \left\langle i' \right| e^{iHt} O e^{-iHt} \left| i \right\rangle.$$
(4.20)

Dieses Resultat entspricht gerade der Spur aus (4.16), sodass man schlicht R zufällige Zustände $|r\rangle$ zeitentwickeln kann, statt jeden Basiszustand einzeln zu berechnen. Eine genaue Analyse zeigt, dass der dabei gemachte Fehler gegenüber dem exakten Ergebnis

von der Ordnung $\frac{1}{\sqrt{RD}}$ ist [28]. Somit benötigt man mit steigender Systemgröße sogar zunehmend weniger Zustände, um eine sinnvolle Näherung zu erhalten. Für hinreichend große Systeme genügt sogar ein einzelner Zustand. Es sei an dieser Stelle betont, dass dieser Fehler, der von dieser stochastischen Methode herrührt, der dominierende Fehler aller numerischen Simulationen dieser Arbeit ist, bei denen kein reiner Zustand, sondern ein Gemisch betrachtet wird. Die Größe $\frac{1}{\sqrt{RD}}$ wird hier stets so gewählt, dass der Fehler von der Größenordnung $O(10^{-3})$ ist. Diese Genauigkeit bildet einen zufriedenstellenden Kompromiss aus moderater Rechenzeit und genauen Ergebnissen.

4.4 Frequenzspektren

Im Zusammenhang mit zeitabhängigen Phänomenen trägt stets auch das Frequenzspektrum der betrachteten Dynamik zum besseren Verständnis bei. Dieses könnte man zum einen indirekt gewinnen, indem man die Zeitentwicklung für einen möglichst langen Zeitraum berechnet und deren Fouriertransformierte numerisch gewinnt. Zum anderen ist es anhand der Chebyshev-Polynomentwicklung jedoch auch möglich das Frequenzspektrum direkt zu berechnen, was in diesem Abschnitt gezeigt und diskutiert wird. Dazu schreiben wir den betrachteten Erwartungswert zunächst mit Hilfe von (4.10) um:

$$\langle S_z(t) \rangle = \operatorname{Tr} \left[\rho \mathrm{e}^{iHt} S_z \mathrm{e}^{-iHt} \right]$$

$$= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{2 - \delta_{n,0}}{\pi} \frac{2 - \delta_{m,0}}{\pi} \operatorname{Tr} \left[\rho T_n(H') S_z T_m(H') \right]$$

$$\times \iint_{-1}^{1} \mathrm{d}\tilde{\omega}_1 \, \mathrm{d}\tilde{\omega}_2 \, \mathrm{e}^{-i(\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2)\beta t} \frac{T_n(\tilde{\omega}_1) T_m(\tilde{\omega}_2)}{\sqrt{(1 - \tilde{\omega}_1^2)(1 - \tilde{\omega}_2^2)}}.$$

$$(4.21)$$

Im Folgenden werden die Abkürzungen $B = \rho T_n(H') S_z T_m(H')$ und $h_{n,m} = \frac{2-\delta_{n,0}}{\pi} \frac{2-\delta_{m,0}}{\pi}$ verwendet. Bildet man nun die Fouriertransformation, so ergibt sich

$$\langle S_z(\omega) \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{n,m} \operatorname{Tr}[B] \iint_{-1}^{1} d\tilde{\omega}_1 d\tilde{\omega}_2 \frac{T_n(\tilde{\omega}_1) T_m(\tilde{\omega}_2)}{\sqrt{(1-\tilde{\omega}_1^2)(1-\tilde{\omega}_2^2)}} \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \mathrm{e}^{-i(\omega+\tilde{\omega}_1\beta-\tilde{\omega}_2\beta)t}, \tag{4.23}$$

worin das Zeitintegral leicht ausgewertet werden kann und schlicht eine Deltafunktion der Form $2\pi\delta(\omega + \tilde{\omega}_1\beta - \tilde{\omega}_2\beta)$ beiträgt. Somit ergibt sich insgesamt

$$\langle S_z(\omega) \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} 2\pi h_{n,m} \operatorname{Tr}[B] \int_a^b \mathrm{d}\tilde{\omega} \, \frac{T_n(\tilde{\omega}) T_m(\tilde{\omega} + \frac{\omega}{\beta})}{\sqrt{(1 - \tilde{\omega}^2)(1 - (\tilde{\omega} + \frac{\omega}{\beta})^2)}}, \qquad (4.24)$$

18

wobei sich die Integrationsgrenzen nach dem Vorzeichen von ω richten:

$$\omega < 0: \qquad a = -1 - \frac{\omega}{\beta}, \qquad b = 1 \tag{4.25}$$

$$\omega \ge 0: \qquad a = -1, \qquad b = 1 - \frac{\omega}{\beta}. \tag{4.26}$$

Der erste problematische Term in Gleichung (4.24) ist die für jedes Summenglied auszuwertende Spur $\text{Tr}[\rho T_n(H')S_z T_m(H')]$, welche jedoch mit Hilfe der Methoden, die in den vorigen Abschnitten erläutert wurden bearbeitet werden kann. Die Lösung zweier Herausforderungen bleibt jedoch bestehen. Zum einen weist das auftretende Integral an beiden Enden des Integrationsintervalls Polstellen auf, sodass eine hinreichend genaue Berechnung hier nicht unproblematisch ist. Zum anderen enthält der Term gleich zwei unendliche Summen, deren Konvergenzeigenschaften unklar sind.

4.4.1 Effiziente Integrationsmethode

Zweck dieses Abschnitts ist die Erläuterung einer Methode, die das Integral aus Gleichung (4.24) unter Berücksichtigung der Divergenzen an den Intervallgrenzen effizient berechnet. Das Grundgerüst des dazu benutzten Programms wurde von F. B. Anders zur Verfügung gestellt und ursprünglich zur Berechnung von Zustandsdichten genutzt. Die Ausgangsidee ist in Abbildung 4.2 illustriert und besteht darin sich das Integral



Abbildung 4.2: Schematische Illustration der Wahl der Stützstellen. Gezeigt sind lediglich die kritischen Beiträge des Integralkerns, da die auftauchenden Chebyshev-Polynome unproblematisch sind. Die im rechten Teil leicht ausstrafierten Intervalle werden abgeschnitten.

zunächst als in zwei einzelne Integrale unterteilt zu denken

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}\tilde{\omega} \frac{T_n(\tilde{\omega})}{\sqrt{1-\tilde{\omega}^2}} \tag{4.27}$$

$$\int_{-1-\frac{\omega}{\beta}}^{1-\frac{\omega}{\beta}} \mathrm{d}\tilde{\omega} \frac{T_n(\tilde{\omega}+\frac{\omega}{\beta})}{\sqrt{1-(\tilde{\omega}+\frac{\omega}{\beta})^2}}.$$
(4.28)

Es handelt sich also im Grunde genommen um ein und das selbe Integral, jedoch ist (4.28) um $\frac{\omega}{\beta}$ nach links verschoben. Da der Integralkern einen sehr großen Gradienten

in der Nähe der Intervallgrenzen aufweist, in der Mitte aber sehr Flach verläuft ist es intuitiv zur numerischen Integration Stützstellen zu verwenden, die an den Rändern sehr dicht beieinander liegen und die mittig große Abstände aufweisen. Im hier angewandten Verfahren werden daher Stützstellen benutzt, deren Abstand zueinander mit wachsender Entfernung zu den Intervallgrenzen exponentiell ansteigt. Liegt den Integralen (4.27) und (4.28) jeweils ein solches Gitter zu Grunde wird, wie auch in Abbildung 4.2 dargestellt, die Schnittmenge beider Intervalle gebildet und der Ausgangsterm aus (7.18) an den übrig bleibenden Stützstellen ausgewertet.

4.4.2 Die Kern-Polynom-Methode

Im Gegensatz zu der Summe aus Gleichung (4.9) enthält die hier diskutierte Doppelsumme (4.24) keinen Term der, wie zuvor die Besselfunktionen, eine klare Konvergenz der Reihe sichert. Es stellt sich somit die Frage in wie weit sie dennoch sinnvoll ausgewertet werden kann. Klar ist, dass in irgendeiner Form eine sinnvolle Trunkierung gefunden werden muss. Mit dieser Problematik im Allgemeinen befassten sich in der Vergangenheit schon viele Mathematiker. An dieser Stelle soll lediglich eine grobe Beschreibung der von Weiße et. al in [28] ausgearbeiteten Kern-Polynom-Methode (KPM) gegeben werden, deren Resultate für die Simulationen in dieser Arbeit verwendet werden. Die grundlegende Idee der Methode ist es beim trunkieren einer unendlichen Summe Gewichtungsfaktoren g_n einzuführen, welche die typischen Fehler (z.B. Gibbs-Oszillationen) herkömmlicher Trunkierung regulieren:

$$f(x) = b_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(x)$$
(4.29)

$$\approx g_0 b_0 + 2 \sum_{n=1}^{N_c} g_n b_n T_n(x) =: f_{KPM}(x).$$
(4.30)

Das Problem die optimalen Koeffizienten g_n zu finden, kann man durch Einführen des Kerns

$$K_{N_c}(x,y) = g_0\phi_0(x)\phi_0(y) + 2\sum_{n=1}^{N_c} g_n\phi_n(x)\phi_n(y)$$
(4.31)

$$\phi_n(x) = \frac{T_n(x)}{\pi\sqrt{1-x^2}}$$
(4.32)

auf das Finden des optimalen $K_{N_c}(x,y)$ verlagern, da unter Verwendung der Orthogonalitätsrelation (4.5)

$$f_{KPM}(x) = \langle K_N(x,y) | f(x) \rangle \tag{4.33}$$

gilt. Um nun einen Kern zu finden, der eine gute Approximation der Funktion f(x)liefert, stellen Weiße et al. drei allgemeine Kriterien auf. (1) der Kern soll positiv sein $K_{N_c}(x,y) > 0 \quad \forall x,y \in [-1,1], (2)$ er soll normiert sein $\int_{-1}^{1} dx K_{N_c}(x,y) = \phi_0(y)$ und (3) der Koeffizient g_1 soll für $N_c \to \infty$ gegen 1 gehen. Um die erste dieser Bedingungen zu sichern kann man eine strikt positive Funktion

$$p(\varphi) = \left| \sum_{\nu=0}^{N_c-1} a_{\nu} \mathrm{e}^{i\nu\varphi} \right|^2 \tag{4.34}$$

$$= g_0 + 2\sum_{n=1}^{N_c-1} g_n \cos(n\varphi)$$
 (4.35)

$$g_n = \sum_{\nu=0}^{N_c - 1 - n} a_\nu a_{\nu+n} \tag{4.36}$$

verwenden, welche sich durch Einsetzen von $\varphi = \arccos(x)$ laut (4.4) leicht auf die hier relevanten Chebyshev-Polynome zurückführen lässt. Als nächstes soll die dritte der genannten Bedingungen genutzt werden. Um den hier verwendeten Jackson-Kern zu erhalten, führt man dazu die Größe

$$Q := \iint_{-1}^{1} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \, (x - y)^2 K_N(x, y) \tag{4.37}$$

ein. Es ist anzumerken, dass $K_N(x,y)$ ein Peak bei x = y aufweist und Q im wesentlichen das Quadrat der Breite dieses Peaks angibt. Fordert man nun die Minimierung von Q, so ergibt sich nach wenigen Rechenschritten, die im wesentlichen Q explizit behandeln und zeigen, dass $Q = g_0 - g_1$ ist, ein Gleichungssystem für die Koeffizienten a_{ν} und man erhält

$$a_{\nu} = \bar{a} \cdot \sin\left(\frac{\pi k(\nu+1)}{N_c+1}\right) \tag{4.38}$$

$$\Rightarrow \qquad g_n = \frac{(N_c - n + 1)\cos\frac{\pi n}{N_c + 1} + \sin\frac{\pi n}{N_c + 1}\cot\frac{\pi}{N_c + 1}}{N_c + 1}. \tag{4.39}$$

Dies sind die später für alle Simulationen verwendeten Koeffizienten g_n , die den Jackson-Kern [29] festlegen. Es sei noch betont, dass genau genommen noch weitere Zwischenschritte anfallen um (4.39) zu erhalten, die an dieser Stelle jedoch nicht im Einzelnen besprochen werden sollen. Für die detaillierte Diskussion sei auf das Originalpaper [28] verwiesen.

5 Vorbereitende Betrachtung eines Zweispinmodells

Um die soweit vorgestellten numerischen Konzepte zu testen, soll in diesem Kapitel ein Toymodell betrachtet werden, bei dem der Zentralspin an ein Bad aus einem einzelnen Spin koppelt. An dieser Stelle wird darüber hinaus auch auf ein äußeres Magnetfeld verzichtet. Der Hamiltonoperator (3.10) nimmt in diesem einfachen Fall die Form

$$\tilde{H} = \vec{S} \cdot \vec{I} \tag{5.1}$$

an. Somit ist der Gesamtspin $\vec{J} = \vec{S} + \vec{I}$ eine Erhaltungsgröße, da $[H, \vec{J}] = \vec{0}$ gilt. Bekanntermaßen ergibt sich für diesen Fall ein Singlett mit Gesamtspin 0 und ein Triplett mit Gesamtspin 1. Dies wird nun zunächst anhand einer einfachen Rechnung gezeigt und die resultierende Zeitentwicklung des Systems angegeben, woraufhin die numerischen Ergebnisse dazu besprochen und kurz analysiert werden. Es sei angemerkt, dass die stochastische Spurbildung, die in Abschnitt 4.3 angegeben wurde, hier selbstverständlich noch nicht eingeht, da es sich lediglich um ein $2 \times 2 = 4$ dimensionales Problem handelt und die Anzahl der zufälligen Zustände, die benötigt würden um den stochastischen Fehler klein zu halten, enorm groß gegenüber den 4 benötigten Basiszuständen zur exakten Berechnung wäre.

5.1 Analytische Lösung

Unser Hamilton
operator lässt sich unter Verwendung des Kronecker-Produkts "
 \otimes " explizit schreiben als

$$H = S^z \otimes I^z + S^x \otimes I^x + S^y \otimes I^y \tag{5.2}$$

$$=\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (5.3)

Zwei der Eigenwerte dieser Matrix sind sofort ablesbar, sie lauten $E_1 = \frac{1}{4}$ und $E_2 = \frac{1}{4}$. Durch Diagonalisieren der verbleibenden 2 × 2-Matrix erhält man schnell auch die übrigen Eigenwerte

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{1}{4} \det \begin{pmatrix} -1 - E & 2\\ 2 & -1 - E \end{pmatrix} = \frac{1}{4} (E^2 + 2E - 3)$$
(5.4)

$$\implies E_3 = \frac{1}{4}, \qquad E_4 = -\frac{3}{4}.$$
 (5.5)

23

Es ergibt sich also ein sogenanntes Triplet mit der Energie $E_{123} = \frac{1}{4}$ und ein Singlett bei $E_4 = -\frac{3}{4}$, sodass das Spektrum die Breite $\Delta E = 2\beta = 1$ aufweist. Die zugehörigen normierten Eigenzustände ergeben sich zu

$$|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = (1,0,0,0)^T \tag{5.6}$$

$$|2\rangle = |\Downarrow\downarrow\rangle = (0,0,0,1)^T \tag{5.7}$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (0,1,1,0)^T$$
(5.8)

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 1, -1, 0)^T.$$
(5.9)

Das Problem ist somit prinzipiell gelöst. Nun sei das System zur Zeitt=0durch den Dichteoperator

$$\rho_{0} = \frac{1}{2} \left(\left| \uparrow \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \uparrow \right| + \left| \uparrow \downarrow \right\rangle \left\langle \uparrow \downarrow \right| \right)$$
(5.10)

gegeben, sodass also der Zentralspin vollständig polarisiert ist und über den Badspin keinerlei Information vorliegt. Die gesuchte Zeitentwicklung ist gegeben durch

$$\langle S^{z}(t)\rangle = \operatorname{Tr}\left(\rho_{0}\mathrm{e}^{iHt}S^{z}\mathrm{e}^{-iHt}\right)$$
(5.11)

$$= \frac{1}{2} \left[\langle 1 | e^{it/4} S^z e^{-it/4} | 1 \rangle + \frac{1}{2} (\langle 3 | + \langle 4 |) e^{iHt} S^z e^{-iHt} (| 3 \rangle + | 4 \rangle) \right]$$
(5.12)

$$= \frac{1}{4} \left[1 + \langle 3| e^{it/4} S^z e^{3it/4} |4\rangle + \langle 4| e^{-3it/4} S^z e^{-it/4} |3\rangle \right]$$
(5.13)

$$=\frac{1}{4}(1+\cos(t)).$$
(5.14)

Zusätzlich ist noch die Fouriertransformierte davon von Interesse, welche



Abbildung 5.1: Die numerisch gewonnene Zeitentwicklung von $\langle S^z(t) \rangle$ eines anfangs polarisierten Zentralspins, der lediglich an einen unpolarisierten Badspin koppelt.

$$\langle S^{z}(\omega)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \,\mathrm{e}^{-i\omega t} \,\langle S^{z}(t)\rangle = \frac{\pi}{2}\delta(\omega) + \frac{\pi}{4}(\delta(\omega-1) + \delta(\omega+1)) \tag{5.15}$$

ergibt. Es sind also schlicht drei Delta-Peaks bei -1, 1 und 0 zu erwarten, wobei das mittlere doppelt so hoch wie die anderen ist. Diese Resultate sollen nun numerisch reproduziert werden.

5.2 Diskussion der Numerik

Es wird nun zunächst die Zeitentwicklung des Problems berechnet, also die in Gleichung (4.9) angegebene Entwicklung explizit ausgeführt. Da diese Methode zur Propagation eines einzelnen Zustands $|\psi\rangle$, bis auf den zu $O(10^{-12})$ reduzierten Fehler durch das Abschneiden der Summe, exakt ist, überrascht es nicht, dass das in Abbildung 5.1 gezeigte, numerische Resultat optisch nicht von der exakten Lösung zu unterscheiden ist. Es bestätigt lediglich, dass die Methode offenbar funktioniert. Interessanter sind die in



Abbildung 5.2: Das numerisch gewonnene Frequenzspektrum $\langle S^z(\omega) \rangle$ eines zunächst polarisierten Spins in Wechselwirkung mit einem unpolarisierten Spin. Dabei wurden für die Simulationen in Gleichung (4.30) zunehmend mehr Summenglieder berücksichtigt.

Abbildung 5.2 gezeigten Resultate für die Fouriertransformation $\langle S^z(\omega) \rangle$ und vor allem wie sich diese in Abhängigkeit von der Anzahl N_c der mitgenommenen Summenglieder in Gleichung (4.24) verhalten. Es ist zu erkennen wie sich das numerische Resultat unter Hinzunahme weiterer Summenglieder an das exakte Ergebnis annähert. Es ist jedoch zu betonen, dass der mittlere δ -Peak, welcher in der Abbildung der Anschauung geschuldet oben abgeschnitten ist, von der Numerik stark überschätzt wird. Um das zu verstehen kann man sich auf das vorliegende Grundproblem besinnen, dass nämlich immer nur eine endliche Anzahl von Chebyshev-Polynomen mitgenommen und somit nur endliche Zeiträume entwickelt werden können. Das Verhalten für $t \to \infty$ kann also nicht berechnet werden und somit auch nicht das Verhalten für $\omega \to 0$. Daher ist das Programm nicht in der Lage genaue Resultate beliebig nah der 0 zu produzieren. Das zeigt sich auch deutlich bei der Betrachtung der spektralen Gewichte der einzelnen Peaks, welche durch Integrieren der numerischen Daten gebildet werden. Für die äußeren Peaks bleibt dieses Gewicht im wesentlichen invariant unter Veränderung von N_c , jedoch ergibt sich nicht der analytisch vorhergesagte Wert $\frac{\pi}{4}$, sondern ein geringerer von etwa 0,26. Für den mittleren Peak ergibt sich überraschender Weise ein geringeres spektrales Gewicht als für die äußeren, welches zudem nicht invariant unter Hinzunahme weiterer Summenglieder ist. Dieses Resultat bestätigt die mangelnde Zuverlässigkeit der Daten nahe der Stelle $\omega = 0$.

6 Exakte Lösung für einheitliche Kopplungskonstanten

In diesem Kapitel wird der Hamiltonoperator (3.2) für den einfachen Fall einheitlicher Kopplungen $A_k = \frac{A}{N}$ untersucht. Legt man die in Abschnitt 3.2.1 beschriebene Zeitskala τ zu Grunde, sind die Kopplungskonstanten also schlicht durch $\frac{1}{N}$ gegeben. Für diese einfache Wahl der A_k soll hier eine analytische Lösung angegeben werden, welche den Fall behandelt, dass sowohl das Elektron, als auch jeder einzelne Badspin zu Beginn polarisiert ist. Anschließend werden, ausgehend von den Resultaten in diesem simplen Fall, kompliziertere Konfigurationen betrachtet.

6.1 Analytische Behandlung

Die von A. Khaetskii et al. in [10] angegebene analytische Lösung des Zentralspinmodells mit einheitlichen Kopplungskonstanten basiert auf der Tatsache, dass im Rahmen des Modells immer nur sogenannte Flip-Flop Prozesse möglich sind, bei denen wechselseitig der Kernspin und ein Badspin umklappen. Dies ist sofort ersichtlich, wenn man den Hamiltonoperator auf die Form

$$\tilde{H}_{hf} = \frac{1}{2N} \sum_{k=1}^{b} 2S^z I_k^z + S^+ I_k^- + S^- I_k^+$$
(6.1)

bringt, wobei $S^{\pm} = S^x \pm i S^y$ bezeichnen und es gilt $S^- | \Uparrow \rangle = | \Downarrow \rangle$, $S^+ | \Downarrow \rangle = | \Uparrow \rangle$ (analog für I_k^{\pm}). Wir beschränken uns nun lediglich auf Zustände bei denen der Elektronspin im Zustand $| \Uparrow \rangle$ vorliegt. Es ist offensichtlich, dass die Systemdynamik, für sämtliche Basiszustände mit identischer Anzahl an Badspins im Zustand Up und im Zustand Down, dieselbe sein muss, da die Badspins aufgrund der einheitlichen Kopplung ununterscheidbar sind. Geht man nun beispielsweise von dem Anfangszustand $| \psi_0 \rangle = | \Uparrow , \downarrow , \cdots , \downarrow \rangle$ aus, so lässt sich dessen Zeitentwicklung direkt als

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t) |\psi_0\rangle + \sum_k \beta_k(t) |\downarrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow_k, \downarrow, \cdots, \downarrow\rangle$$
(6.2)

schreiben, wobei die Normierungsbedingung $|\alpha(t)|^2 + \sum_k |\beta_k(t)|^2 = 1$ erfüllt sein muss und die Anfangsbedingung $\beta_k(0) = 0$ gilt. Bezüglich dieses Zustands gilt

$$\langle S^{z}(t) \rangle_{\psi} = \langle \psi(t) | S^{z} | \psi(t) \rangle$$

= $\frac{1}{2} \left(|\alpha|^{2} - 1 + (1 - \sum_{k} |\beta_{k}|^{2}) \right) = |\alpha|^{2} - \frac{1}{2},$ (6.3)

27

sodass es uns genügt $\alpha(t)$ zu berechnen. Um dies zu tun verwendet man die Schrödingergleichung (4.1) und führt einen Koeffizientenvergleich durch. Das führt auf folgendes System von gekoppelten Differentialgleichungen:

$$i\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t} = -\frac{A}{4}\alpha(t) + \frac{A}{2N}\sum_{k}\beta_{k}(t) \tag{6.4}$$

$$i\frac{\mathrm{d}\beta_l}{\mathrm{d}t} = \frac{A}{2N}\alpha(t) + \left(\frac{A}{4} - \frac{A}{2N}\right). \tag{6.5}$$

Führt man nun eine Laplace-Transformation beider Gleichungen durch, lassen sich diese unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen so ineinander einsetzen, dass sich

$$\alpha(\omega) = \frac{i}{i\omega + \frac{A}{2} - \frac{A^2}{4N}\left(i\omega + \frac{A}{2N}\right)^{-1}}$$
(6.6)

ergibt. Dazu wurde zunächst die Transformierte $\alpha(\tilde{\omega})$ gebildet und dann $i\tilde{\omega} = i\omega - \frac{A}{4}$ substituiert. Der resultierende Term besitzt zwei Singularitäten auf der imaginären Achse bei $\omega_1 = 0$ und $\omega_2 = -i\frac{A}{2}(1+\frac{1}{N})$. Man kann nun die Rücktransformation

$$\alpha(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} i d\omega \, \mathrm{e}^{(\omega + iA/4)t} \alpha(\omega) \tag{6.7}$$

über den Residuensatz auswerten, indem man, wie in Abbildung 6.1 illustriert, das Integral im unendlichen schließt und erhält

$$\alpha(t) = e^{iAt/4} \left(\frac{1}{1+N} + \frac{e^{-iAt(1+\frac{1}{N})/2}}{1+\frac{1}{N}} \right)$$
(6.8)

$$\Longrightarrow \langle S^{z}(t) \rangle = \frac{1}{2} + \frac{2N}{(1+N)^{2}} \left(\cos(\Omega_{N/2}t) - 1 \right), \tag{6.9}$$

mit $\Omega_{N/2} = \frac{4}{2} \left(1 + \frac{1}{N} \right)$. Diese Rechnung lässt sich auf beliebige Anfangszustände übertragen, die eine feste Anzahl umgeklappter Badspins gegenüber dem antiferromagnetischen Zustand $|\uparrow, \downarrow, \cdots, \downarrow\rangle$ enthalten. An dieser Stelle sei exemplarisch das Resultat für den Zustand $|\psi_1\rangle = \sum_k \alpha_k(t) |\uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow_k, \downarrow, \cdots, \downarrow\rangle$ angegeben:

$$\langle S^{z}(t) \rangle = \frac{1}{2} + \frac{2(N-2)}{(N-1)^{2}} (\cos(\Omega_{N/2-1}t) - 1) - \frac{2\left|\sum_{k} \alpha_{k}\right|^{2}}{N} \\ \times \left[\frac{N-2}{(N-1)^{2}} (\cos(\Omega_{N/2-1}t) - 1) - \frac{2(N-1)}{(N+1)^{2}} (\cos(\Omega_{N/2}t) - 1) \right], \quad (6.10)$$

mit $\Omega_{N/2-1} = \frac{A}{2}(1-\frac{1}{N})$. Zustände bei denen anfangs eine größere Anzahl Kernspins geflipped ist, führen analog auf mehrere, zur Dynamik beitragende Frequenzen Ω . Somit lässt sich das vorliegende Problem für sämtliche Zustände der hier verwendeten Basis exakt lösen und für beliebige Anfangskonfigurationen sollte das resultierende



Abbildung 6.1: Der gewählte Integrationsweg zur Auswertung des Integrals aus (6.7). Der hinzugefügte Weg zum schließen des Integrals trägt nichts bei, da der Integralkern für $i\omega \to \infty$ verschwindet.

Signal immer durch eine Überlagerung der Frequenzen $\Omega_{N/2-n} = \frac{A}{2}(1 + \frac{1-2n}{N})$, wobei gilt $n \in \{0,1,\ldots,\frac{N}{2}-1\}$, darstellbar sein. Zur Veranschaulichung der Resultate sind in Abbildung 6.2 sowohl die Zeitentwicklung, als auch das zugehörige Frequenzspektrum der Zentralspinpolarisation aufgetragen, welche beide numerisch berechnet wurden. Gezeigt sind die Ergebnisse für einen Zustand $|\psi_1\rangle$ bei dem zu Beginn ein Kernspin geflipped ist und die Koeffizienten $\alpha_k(0)$ zufällig gewählt wurden, sowie für einen Zustand $|\psi_2\rangle = \sum_{kl} \alpha_{kl}(t) |\uparrow, \downarrow, \uparrow_k, \downarrow \cdots, \uparrow_l, \downarrow\rangle$ mit zwei umgeklappten Badspins und ebenfalls zufälligen Koeffizienten $\alpha_{kl}(0)$. Es ist zu erkennen, dass das Signal wie erwartet strikt periodisch verläuft und das Spektrum exakt die vorhergesagten Frequenzen $\Omega_{N/2-n}$ enthält. Für Systeme mit einer größeren Anzahl Badspins ändert sich die Dynamik nicht signifikant. Es sei an dieser Stelle noch darauf hingewiesen, dass zum ziehen von Zufallszahlen während der gesamten Arbeit eine Routine aus den Numerical Recipes [30] verwendet wird.

6.2 Numerische Untersuchung beliebiger Konfigurationen

In diesem Abschnitt wird die Systemdynamik für kompliziertere Anfangsbedingungen diskutiert. Da im vorangehenden Teil bereits eine exakte Behandlung sämtlicher Basiszustände angegeben wurde, ist das Problem zwar prinzipiell gelöst, jedoch ist die genaue Gestalt der resultierenden Kurven nicht offensichtlich. Klar ist aber, dass für einheitliche Kopplungskonstanten A_k in keinem Fall ein Abklingen des Signals zu erwarten ist, sondern immer eine strikt periodische Bewegung vorliegen wird. Hier sollen nun insbesondere zwei bestimmte Ausgangskonfigurationen behandelt werden. Zum einen der in Abschnitt 3.2.1 angesprochene Fall, in dem das System in Form eines Gemischs,



Abbildung 6.2: l. die Zeitentwicklung und r. das Frequenzspektrum der Zentralspinpolarisation für zufällig generierte Anfangszustände mit einem geflippten Spin $|\psi_1\rangle$ (o.) und zwei geflippten Spins $|\psi_2\rangle$ (u.). Die Frequenzskala ist durch $\omega^* = \frac{\omega}{\Omega_{N/2}}$ gegeben. Die Legende gibt dabei die Beschriftung der y-Achse an, wobei $\langle S^z(\omega) \rangle$ in beliebigen Einheiten angegeben ist. Das zugrundeliegende System enthält 16 Kernspins.

beschrieben durch den Dichteoperator

$$\rho_{0} = \frac{2}{D} \sum_{i=1}^{D/2} |i\rangle \langle i|, \qquad (6.11)$$

vorliegt, bei dem alle Badspinkonfigurationen gleich wahrscheinlich sind. Zum anderen ein reiner Zustand, der vollständig zufällig generiert wird, d.h. durch

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{D/2} \alpha_i |i\rangle \tag{6.12}$$

gegeben ist, wobei die Koeffizienten α_i zufällige, komplexe Zahlen sind, welche die Normierungsbedingung $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$ erfüllen. Die für diese Anfangsbedingungen, mittels der Chebyshev-Polynomentwicklung berechneten Ergebnisse sind in Abbildung 6.3 gegenübergestellt, wobei erneut ein System mit N = 16 Badspins betrachtet wurde. Zum einen ergibt sich, dass die Frequenzspektren wie erwartet sämtliche Frequenzen $\Omega_{N/2-n}$ in unterschiedlicher Ausprägung enthalten. Interessant ist jedoch, dass hier die Frequenz $\Omega_{N/2-6}$ die dominierende ist und nicht $\Omega_{N/2-7}$. Zum anderen ist zu erkennen, dass sich die Systemdynamik in den beiden Fällen fast nicht voneinander unterscheidet. Da zum
Berechnen von $\langle S^z(t) \rangle$ mit der durch den Dichteoperator (6.11) gegebenen Anfangskonfiguration eine Spur ausgewertet werden muss, ist dieses Ergebnis nicht vollständig überraschend. Wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, kann man sich nämlich gerade zu Nutze machen, dass die Spur durch eine geschickte Wahl zufälliger verschränkter Zustände approximiert werden kann. Die dazu verwendeten Zustände waren jedoch nicht normiert und ihre Koeffizienten an bestimmte Forderungen geknüpft, während die α_i in (6.12) schlicht gleichverteilt aus der komplexen Ebene gewählt wurden. Es zeigt sich also, dass das entwickeln eines einzelnen zufälligen verschränkten Zustands der Spurauswertung bereits sehr nahe kommt. Anschaulich gesagt wird schließlich beim Auswerten einer Spur schlicht über die Beiträge aller Basiszustände gemittelt, während der einzelne Zustand Verschränkungen aller Basiszustände miteinander enthält, wodurch effektiv auch eine Mittelung über die Basis resultiert. Dass die Verschränkungen hierbei eine wichtige



Abbildung 6.3: Gezeigt sind die Zeitentwicklung (l.) und das Frequenzspektrum (r.) der Zentralspinpolarisation. Im oberen Teil der Abbildung sind die numerischen Resultate für einen gemischten Ausgangszustand ψ_0 (6.12) und im unteren Teil für ein Gemisch, gegeben durch ρ_0 aus (6.11), gezeigt. Die Einheiten der *y*-Achse im linken Teil der Abbildung sind erneut beliebig und um 0.5 [a.u.] nach unten verschoben. Es wurde erneut N = 16gewählt.

Rolle spielen lässt sich anhand der Zeitentwicklung zufällig gebildeter Produktzustände verdeutlichen. Zur Generierung dieser, wird jeweils ein Anfangszustand

$$|\psi_{\text{prod}}\rangle = |\Uparrow\rangle \otimes |\phi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_N\rangle \tag{6.13}$$

$$|\phi_n\rangle = \alpha_n \left|\uparrow_n\right\rangle + \beta_n \left|\downarrow_n\right\rangle \tag{6.14}$$

mit ebenfalls gleichverteilt gezogenen Koeffizienten α_n und β_n generiert. Abbildung 6.4 zeigt die Entwicklung für einen einzelnen solchen Zustand und das Resultat für ein Gemisch. Aus dem direkten Vergleich der Kurven geht hervor, dass aufgrund der



Abbildung 6.4: Im linken Teil ist erneut $\langle S^z(t) \rangle$ für ein Gemisch, also die in (6.11) angegebene Anfangskonfiguration, abgebildet. Rechts ist im Vergleich das entsprechende Resultat für einen zufälligen Produktzustand ψ_{prod} gezeigt, siehe Gleichung (6.13).

fehlenden Verschränkungen ein deutlicher Unterschied in der Dynamik gegenüber der Spurauswertung auf Grundlage eines Gemischs besteht, obwohl auch in diesen Zustand Beiträge aller Basiselemente eingehen. Wie zu erwarten war, ist es jedoch so, dass eine Mittelung über eine Vielzahl solcher Produktzustände die Dynamik der Spurauswertung reproduziert, was im rechten Teil von Abbildung 6.5 für 50 zufällige Produktzustände gezeigt ist. Man kann nun auch die Koeffizienten α_n und β_n so beschränken, dass stets



Abbildung 6.5: Über jeweils 50 Zustände der Basis (l.) und zufällige Produktzustände (r.) gemittelte Ergebnisse für die Zentralspinpolarisation. Das Bad besteht hier erneut aus 16 Spins.

der eine 0 und der andere 1 ist, somit entsprechen die Zustände $|\psi_{\rm prod}\rangle$ gerade den

hier verwendeten Basiszuständen und eine Mittelung über eine Vielzahl dieser würde die Spur ebenfalls approximieren können. In der linken Hälfte von Abbildung (6.5) ist das Resultat für eine Mittelung über 50 zufällige Zustände unserer Basis gezeigt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Mittelung über die Basiszustände die schlechteste Approximation der Spurbildung liefert. Mit der gleichen Anzahl zufälliger Produktzustände aus Gleichung (6.13) erhält man eine weitaus bessere Näherung, welche jedoch bereits auch durch einen einzelnen zufällig verschränkten Zustand erzielt werden kann.

7 Beliebige Kopplungen ohne äußeres Magnetfeld

Im vorigen Kapitel wurde der Hamiltonoperator (3.5) für den Fall einheitlicher Kopplungskonstanten und keinem äußeren Magnetfeld behandelt. Es wurde eine analytische Lösung des Problems angegeben, durch welche die Systemdynamik vollständig verstanden werden kann. Ein externes Magnetfeld wird auch in diesem Kapitel noch nicht in Betracht gezogen. Ein Elektron in einem Halbleiter-QP wechselwirkt jedoch unterschiedlich stark mit den einzelnen Atomkernen, was aufgrund seiner Wellenfunktion, die selbstverständlich keine identische Aufenthaltswahrscheinlichkeit an jedem Kern liefert, offensichtlich ist. Daher ist die Annahme einheitlicher Kopplungskonstanten anscheinend ein für die Theorie angenehmer, jedoch wenig realistischer Fall. In diesem Kapitel sollen nun also Realisationen der A_k betrachtet werden, welche dem Experiment näher kommen.

7.1 Selbstmittelung

Da ein QP in der Regel etwa 10⁵ Atome beinhaltet, wir aber maximal $N \gtrsim 20$ Badspins simulieren können, stellt sich die Frage in wie weit die hier verwendete Numerik überhaupt Aussagen über den Polarisationszerfall in realen Szenarien liefern kann. Um diese Problematik zu behandeln, wählen wir schlicht N rein zufällige Kopplungskonstanten aus einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung aus, um unser System zu charakterisieren. Dieses Vorgehen basiert auf der Idee, die Dynamik eines gesamten Quantenpunktes zu simulieren, indem man den Beitrag einiger darin enthaltener, zufällig ausgewählter Kerne berücksichtigt und den aller übrigen Kernspins vernachlässigt. Umgekehrt gesprochen kann man sich das so denken, dass zunächst alle Badspins berücksichtigt werden und beobachtet wird wie sich das System unter zunehmender Vernachlässigung zufälliger Teile des Bades verhält und ob die Resultate für eine verhältnismäßig geringe Anzahl berücksichtigter Spins noch Aufschluss über das Gesamtsystem liefern können. Die erste Frage die sich bei diesem Vorgehen stellt ist die, ob die gemessene Zeitentwicklung für eine feste Anzahl an Badspins N überhaupt invariant unter der zufälligen Realisation der Kopplungskonstanten ist. Wenn dies für ein beliebiges Szenario und aus ein und derselben Wahrscheinlichkeitsverteilung gezogene A_k der Fall ist, so spricht man von einem selbstmittelnden System. In Abbildung 7.1 ist $\langle S^z(t) \rangle$ für verschieden große Bäder aufgetragen, wobei das System anfangs durch den Dichteoperator (6.11) gegeben ist. Sofern nicht explizit anders angegeben, liegt für den Rest dieser Arbeit allen Simulationen immer diese Anfangskonfiguration zu Grunde. Die Kopplungskonstanten wurden dabei gleichverteilt aus dem Intervall [0.5:1] gezogen.



Abbildung 7.1: Gezeigt ist die Zentralspinpolarisation für aufsteigende Systemgröße, wobei jeweils 10 zufällige Konfigurationen der A_k betrachtet und für jeden Wert von N die zwei am stärksten voneinander abweichenden Resultate aufgetragen wurden. Wie allen Folgenden Simulationen, liegt, sofern nicht anders angegeben, auch diesen ein Gemisch zu Grunde.

Insgesamt wurden für jede angegebene Badgröße 10 verschiedene Realisationen der A_k gebildet und die resultierende Dynamik für all diese verglichen. Für die Abbildung wurden von diesen jeweils die am stärksten voneinander abweichenden ausgewählt. Es ist zu erkennen, dass für verhältnismäßig kleine Bäder noch eine signifikante Variation zwischen den einzelnen Kurven auftritt, ab etwa 16–18 berücksichtigten Spins jedoch kaum noch Abweichungen auszumachen sind. Es lässt sich somit folgern, dass es sich hier um ein selbstmittelndes System handelt. Für aus anderen Wahrscheinlichkeitsverteilungen gezogene Kopplungen ergibt sich zwar jeweils eine neue Dynamik, jedoch findet man in Hinblick auf die Selbstmittelung stets und für beliebige Anfangsbedingungen das selbe Resultat.

7.2 Kurzzeitentwicklung

In diesem Abschnitt soll kurz auf die Kurzzeitentwicklung der Zentralspinpolarisation im magnetfeldfreien und -behafteten Fall eingegangen werden. Wie in Abschnitt 3.2.1 für $\vec{B} = \vec{0}$ gezeigt wurde, sollte die Kurzzeitentwicklung bei Verwendung des Hamiltonoperators (3.21) auf ein und derselben Zeitskala ablaufen, unabhängig von der Systemgröße, den Anfangsbedingungen und der konkreten Realisation der A_k . Abbildung 7.2 stellt die Kurzzeitentwicklung für die, im vorigen Kapitel diskutierten, einheitlichen Kopplungskonstanten und die im vorigen Abschnitt verwendeten, aus einer



Abbildung 7.2: Kurzzeitentwicklung für einheitliche Kopplungskonstanten (o.) und zufällig aus einer Gleichverteilung gewonnene (u.) für Systeme mit 14 – 20 Badspins.

Gleichverteilung gewonnenen dar. Erneut wurde der Dichteoperator (6.11) als Anfangskonfiguration gewählt. Die Tatsache, dass die Kernspins hierbei völlig beliebig orientiert sind wird für die spätere analytische Betrachtung des Problems noch eine Rolle spielen. Der in der Abbildung gezeigte Vergleich zeigt sofort, dass der Hamiltonian (3.21) mit der Zeitskala $\tau = t \cdot A$ eine stark variierende Dynamik liefert, während die Kurven, denen T^* zu Grunde liegt, wie erwartet übereinanderliegen. An dieser Stelle sei noch bemerkt, dass die Wahl der Zeitskala T^* für den Fall einheitlicher Kopplungen der Wahl $A_k = \frac{A}{\sqrt{N}}$ entspricht. Dies entspricht dem Resultat, welches J. Jäger bereits voriges Jahr in ihrer Diplomarbeit ausgearbeitet hat [12]. Da hier das Anliegen besteht, die Physik eines QPs mit etwa 10⁵ Kernspins zu simulieren wird im Folgenden stets letztere Zeitskala verwendet, da diese den Zeitraum auf dem sich die Polarisation des Zentralspins ändert, wenn auch nur kurzfristig, invariant unter Veränderung der Systemgröße lässt.

7.3 Mean-Field-Lösung

Dieser Abschnitt widmet sich einem analytischen Ansatz zur Lösung des Zentralspinmodells ohne äußeres Magnetfeld. Es handelt sich genauer gesagt um eine Mean-Field-Beschreibung (MF-Beschreibung) des Systems, welche in dieser Form von Merkulov et al. [9] vorgestellt wurde. Anschaulich verdeutlicht ist die Grundidee des Verfahrens eine einfache. Ein Elektron in einem Halbleiter-QP ist generell von einer Vielzahl von Kernen umgeben und in unserem Modell wechselwirkt das Elektron mit jedem dieser Kernspins, während jeder einzelne Kern nur das Feld des einen Elektrons spührt. Da der Zentralspin also einem wesentlich stärkeren Gesamtfeld ausgesetzt ist als die jeweiligen Kernspins, ergibt sich die Schlussfolgerung, dass somit auch die Zeitskala auf der der Zentralspin seine Ausrichtung ändert wesentlich kleiner ist als die auf der die Badspins dies tun. Somit wird das Bad im Folgenden als näherungsweise konstantes, effektives Magnetfeld aufgefasst, welches durch

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \frac{1}{\mu_B g_e} \left\langle \sum_k A_k \vec{I}_k \right\rangle \tag{7.1}$$

gegeben ist. Somit lässt sich der nun betrachtete Hamiltonoperator des Systems in der Form

$$\tilde{H}_{MF} = \mu_B g_e T^* \vec{S} \cdot \vec{B}_{\text{eff}} \tag{7.2}$$

$$=T^*\sum_{k=1}^N A_k \begin{pmatrix} \langle I_k^z \rangle & \langle I_k^x \rangle - i \langle I_k^y \rangle \\ \langle I_k^x \rangle + i \langle I_k^y \rangle & - \langle I_k^z \rangle \end{pmatrix}$$
(7.3)

schreiben. Es werden hier also letztlich die Operatoren der Badspins durch ihre Erwartungswerte ersetzt und die Gesamtheit dieser Operatoren als effektives Magnetfeld aufgefasst. Diese, durch anschauliche Argumente motivierte, Betrachtungsweise besitzt den typischen Charakter einer quantenmechanischen MF-Näherung. Da das $B_{\rm eff}$ sich aus einer Vielzahl kleiner, zufällig orientierter magnetischer Momente zusammensetzt, charakterisiert man dieses Feld nun durch eine gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung, welche Richtung und Betrag des effektiven Magnetfeldes beschreibt [31]:

$$W(\vec{B}_{\text{eff}}) = \frac{1}{\pi^{3/2} \Delta_B^3} \exp\left(-\frac{\vec{B}_{\text{eff}}^2}{\Delta_B^2}\right),\tag{7.4}$$

$$\Delta_B^2 = \frac{1}{2(\mu_B g_e)^2} \sum_k A_k^2 = \frac{1}{2(\mu_B g_e T^*)^2}.$$
(7.5)

Wie leicht zu erkennen ist, weist $W(\vec{B}_{\text{eff}})$ keine Winkelabhängigkeit auf und \vec{B}_{eff} geht nur betragsmäßig ein, sodass die Verteilung des Magnetfeldes kugelsymmetrisch ist. Dass ein Spin in einem konstanten Magnetfeld *B* eine Larmorpräzession mit der Frequenz $\omega = g_e \mu_B B$ ausführt ist wohlbekannt. Die zugehörige Bewegungsgleichung der Polarisation des Elektronspins kann man in der Form

$$\vec{S}(t) = \left(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}\right) \vec{n} + \left(\vec{S}_0 - \left(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}\right) \vec{n}\right) \cos(\omega t) \\ + \left[\vec{n} \times \left(\vec{S}_0 - \left(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}\right) \vec{n}\right)\right] \sin(\omega t),$$
(7.6)

schreiben. Diese Gleichung wird nun auf Grundlage der Verteilung (7.4) über alle möglichen Ausrichtungen des Magnetfeldes gemittelt, d.h. es wird

$$\left\langle \vec{S}(t) \right\rangle = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \sin(\theta) \mathrm{d}\theta \int_0^{B_{max}} B^2 \mathrm{d}B \ W(\vec{B}_{\text{eff}}) \vec{S}(t).$$
(7.7)

38

gebildet, wobei für eine große Anzahl Badspins $N \to \infty$ auch $B_{max} \to \infty$ folgt. In unserem Fall gilt das Interesse lediglich der z-Komponente des Zentralspins, es ist also $\vec{S}(t) = S(t)\vec{e}_z$. Setzt man das ein, so erhält man insgesamt die Lösung

$$\langle S^{z}(t)\rangle = \frac{S_{0}}{3} \left[1 + 2\left(1 - \left(\frac{t}{2T^{*}}\right)^{2}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{t}{2T^{*}}\right)^{2}\right) \right] =: M(t).$$
(7.8)

Es ergibt sich also eine Kurve, die für $t \to \infty$ den Wert $\frac{S_0}{3}$ annimmt, was auf den ersten Blick in Übereinstimmung mit den bisher gezeigten Resultaten steht. Dies ist jedoch ein nicht unbedingt intuitives Ergebnis, denn für t = 0 waren sämtliche Badspins unpolarisiert und einzig der Zentralspin trug eine Polarisation von $S_0 = \frac{1}{2}$. Somit hätte man annehmen können, dass sich die anfangs vorhandene Polarisation gleichmäßig im System verteilt und nach hinreichend langer Zeit jeder Spin die Polarisation $\frac{1}{2N}$ tragen würde. Dass dies nicht der Fall ist stellt ein interessantes Resultat dar und ist auf die, durch die Anfangsbedingungen eingefügte, Einschränkung des Phasenraums des Systems zurückzuführen. Es sei noch betont, dass an dieser Stelle keinerlei Annahmen über die genaue Realisation der Kopplungskonstanten A_k eingeflossen ist, sodass das Resultat (7.8) für $N \to \infty$ prinzipiell allgemein gültig ist. Es stellen sich an dieser Stelle jedoch unmittelbar einige Fragen. Zunächst einmal haben wir in Kapitel 6 gesehen, dass sich für einheitliche Kopplungskonstanten eine strikt periodische Bewegung ergibt. Daher gilt es zu klären, in welchen Fällen die Anfangs vorhandene Polarisation tatsächlich verloren geht, also sich nach dem anfänglichen Zerfall der Gleichgewichtswert $\frac{S_0}{3}$ permanent einstellt, da offenbar Konfigurationen existieren, bei denen dies nicht der Fall ist. Wie genau die vorgestellte Lösung M(t) tatsächlich mit den numerischen Resultaten übereinstimmt muss ebenfalls genauer beleuchtet werden, da bei den Simulationen immer Effekte durch die endliche Systemgröße eine Rolle spielen. Zudem ist interessant, worin der Erfolg dieser sehr einfachen MF-Betrachtung begründet liegt, da die zu Beginn erwähnten, auf rein anschaulicher Basis vorgebrachten Argumente zwar einleuchtend erscheinen, sie jedoch keinerlei quantenmechanische Effekte berücksichtigen. Diese drei zentralen Fragen werden im Folgenden genauer beleuchtet.

7.3.1 Einfluss der Kopplungskonstanten

Betrachten wir nun zunächst einmal wie genau sich die Wahl der Kopplungskonstanten in der resultierenden Dynamik des Zentralspins äußert. Zu diesem Zweck werden hier drei verschiedene Varianten zur Bestimmung der A_k gegenübergestellt. Die ersten beiden basieren auf zufällig gewählten Kopplungen, wobei die einen aus einer Gaußund die anderen aus einer Gleichverteilung generiert werden. Beide dieser Verteilungen sind hier der Vergleichbarkeit halber auf das Intervall [0.5 : 1] eingeschränkt und die Gaußverteilung ist somit um 0.75 zentriert. Die letzte Variante beinhaltet auf selbigem Intervall äquidistant angeordnete Kopplungen, was bedeutet dass der Betrag der Kopplungsstärke linear mit dem Index des Kernspins ansteigt:

$$A_k = 0.5 + \frac{k-1}{2(N-1)}.$$
(7.9)

Es liegen also drei Realisationen der A_k vor, die unterschiedlich weit gestreut auf ein und demselben Intervall liegen. Dabei kommen die gaußverteilten dem Fall einheitlicher Kopplungen am nächsten und die linear aufsteigenden sind am breitesten über das Intervall verteilt. Abbildung 7.3 zeigt $\langle S^z(t) \rangle$ für die drei genannten Varianten und zwei



Abbildung 7.3: Hier ist $\langle S^z(t) \rangle$ für verschiedene Realisationen der A_k aufgetragen. In allen Fällen gilt $A_k \in [0.5 : 1]$, wobei oben Zufallszahlen aus einer Gaußverteilung und in der Mitte aus einer Gleichverteilung gezogen wurden, während unten schlicht äquidistante Kopplungen zu Grunde liegen. Links sind Systeme mit 14 und rechts mit 18 Badspins aufgetragen.

verschiedene Badgrößen. Für die gaußverteilten Kopplungskonstanten sind zunächst ähnliche Revivaleffekte zu erkennen, wie für den einheitlichen Fall, allerdings wird die Amplitude dieser Effekte monoton kleiner und langfristig bleibt lediglich eine willkürlich scheinende Oszillation. Zusätzlich geht das Abflachen der Elektronpolarisation bei Vergrößerung des Bades zunehmend rapider von statten. Für die gleichverteilten und linear steigenden Kopplungen ergibt sich hingegen ein insgesamt sehr ähnlicher Verlauf. In beiden Fällen tritt die Dekohärenz so schnell auf, dass kein ausgeprägtes Wiederkehren der Polarisation zu erkennen ist. Es deutet sich lediglich an, dass die Oszillationen um den Gleichgewichtswert für größere Systeme und breiter gestreute Kopplungen geringer werden. Diese Effekte sind für die hier diskutierte Anfangskonfiguration (6.11) anscheinend sogar unabhängig davon, ob die A_k rein zufällig gewonnen werden, oder einer strikten Vorschrift gehorchen. Insgesamt lässt sich aus diesen Beobachtungen folgern, dass für nicht einheitliche Kopplungen und sehr große Systeme in keinem Fall Revivaleffekte zu erwarten sind und somit die Theorie von Merkulov et al. bestätigt wird. Die zu beobachtenen Oszillationen um den Endwert sind dabei eindeutig der endlichen Größe des simulierten Systems geschuldet. Es sei noch betont, dass die Entwicklung des Zentralspins offenbar für beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilungen, aus denen die Kopplungen gewonnen werden, ab einer gewissen Systemgröße invariant bleibt, außer dass verschiedene Verteilungen auch unterschiedliche Zeitskalen T^* mit sich bringen. Fortan werden für sämtliche Simulationen die gleichverteilten Kopplungskonstanten verwendet, da die breite Fächerung der A_k offenbar eine Dynamik induziert, die dem Fall großer Systeme am nächsten kommt. Die linear aufsteigenden A_k würden dieser Argumentation zu Folge zwar die noch bessere Wahl sein, allerdings besteht allgemein die Möglichkeit vorhandene Finite-Size-Effekte durch Mittelung über eine Vielzahl zufälliger Konfigurationen zu unterdrücken, was bei einer immer gleichen Verteilung der A_k nicht möglich wäre.

7.3.2 Vergleich der Numerik mit der MF-Betrachtung

In diesem Abschnitt soll kurz besprochen werden in wie weit die numerischen Resultate mit der Vorhersage (7.8) übereinstimmen. Dies stellt einen guten Test für die Brauchbarkeit der hier durchgeführten Simulationen dar. Aufgrund der Tatsache, dass für das verwendete Box-Modell lediglich ~ 20 Badspins exakt berechnet werden können, ein realer Quantenpunkt jedoch etwa 10^5 Kerne enthält, ist nämlich nicht von vorneherein klar, ob die numerischen Daten ein realisitisches Szenario auch nur annähernd widerspiegeln können. Sollte jedoch eine gute Übereinstimmung mit der Theoriekurve vorliegen ist gezeigt, dass das betrachtete Modell prinzipiell auch praxisrelevante Resultate liefern kann. Abbildung 7.4 zeigt die Kurzzeitentwicklung für 3 Systeme aufsteigender



Abbildung 7.4: Kurzzeitentwicklung für aufsteigende Systemgröße innerhalb der Simulation im Vergleich mit der analytisch abgeleiteten Kurve M(t). Der im linken Teil des Plots markierte Bereich ist rechts vergrößert dargestellt.

Größe im Vergleich mit M(t). Es ist zu erkennen, dass bereits schon für 14 Badspins eine recht gute Annäherung an die Analytik stattfindet, welche sich unter Hinzunahme weiterer Kernspins noch verbessert. Ausserdem deutet sich an, dass die numerischen Ergebnisse für $N \to \infty$ konvergieren, da die erkennbare Änderung der Kurven von 14 zu 18 Badspins um einiges größer ist als die von 18 zu 22. Insgesamt stimmen unsere Simulationen also in zufriedenstellendem Maße mit (7.8) überein und bestätigen somit das analytische Resultat M(t). Zudem liefern sie auch bereits für die hier erreichbare Systemgröße Resultate, die dem Limes $N \to \infty$ recht nahe kommen, was den Nutzen des hier verwendeten Modells unterstreicht.

7.3.3 Dynamik der Badspins

Als Grundidee zum Herleiten der Lösung (7.8) wurde angenommen, dass die Dynamik aller Badspins aufgrund der Topologie des Systems wesentlich langsamer ist, als die des Zentralspins, woraus gefolgert wurde, dass das effektive Magnetfeld (7.1) näherungsweise konstant bleibt. Betrachtet man jedoch den Hamiltonoperator des Systems und die hier verwendeten Anfangsbedingungen wird schnell klar, dass diese Annahme auf quantenmechanischer Ebene nicht korrekt sein kann. Da das System hier anfangs durch den Dichteoperator $\rho_0 = \frac{2}{D} \sum_{i=1}^{D/2} |i\rangle \langle i|$ beschrieben wird, ist $B_{\text{eff}}(t=0) = 0$, da die Badspins vollständig unpolarisiert sind. Wie in Abschnitt 3.2 angesprochen, ist



Abbildung 7.5: Das effektive Magnetfeld gegen die Zentralspinpolarisation aufgetragen, wobei ein System mit 18 Kernspins gezeigt ist und die Legende die y-Achsenbeschriftung für die jeweilige Kurve angibt.

aber der Gesamtspin S_{ges}^z des Systems erhalten, da das Elektron seine Polsarisation ausschließlich durch wechselseitige Umklappprozesse an die Badspins übertragen kann. Somit nimmt B_{eff} nur einen von null verschiedenen Wert an, indem die Badspins die Polarisation des Elektrons aufnehmen. Aus diesem Grund findet die Baddynamik offenbar auf derselben Zeitskala statt, wie die des Zentralspins. Abbildung 7.5 illustriert diesen Sachverhalt, indem B_{eff} und $\langle S^z \rangle$ im Vergleich gezeigt sind und es ist zu erkennen, dass das effektive Magnetfeld sich immer instantan mit der Elektronpolarisation ändert und keinesfalls als näherungsweise konstant angesehen werden kann. Somit scheint die zuvor getroffene Annahme zunächst ungerechtfertigt. Es bietet sich nun an einen genaueren Blick auf die Dynamik der einzelnen Badspins zu werfen, um zu verstehen weshalb M(t)die Zeitentwicklung des Zentralspins dennoch korrekt beschreibt. Zu diesem Zweck sind in Abbildung 7.6 die Zeitentwicklung dreier Badspins für N = 18 gezeigt. Oben im di-



Abbildung 7.6: Zeitentwicklung dreier ausgewählter Kernspins, deren Kopplungsstärke mit steigendem Index abnimmt, im Vergleich zur Zentralspindynamik für insgesamt 18 Badspins. Erneut gibt die Legende die jeweilige Beschriftung der *y*-Achse an. Oben und unten sind die gleichen Daten gezeigt, wobei der *y*-Achsenausschnitt unten auf die Baddynamik abgestimmt ist.

rekten Vergleich zum Zentralspin und unten nur die Kernspins. Dabei sind letztere so geordnet, dass $\langle I_1^z \rangle$ zur größten und $\langle I_{18}^z \rangle$ zur kleinsten Kopplungskonstante gehört. Es sind verschiedene interessante Aspekte zu erkennen. Aufgrund der Gesamtspinerhaltung des Hamiltonoperators ist klar, dass die Polarisation jedes einzelnen Badspins zunächst von 0 ausgehend stark anwächst und kurz darauf wieder abnimmt, was durch das bereits diskutierte Kurzzeitverhalten des Zentralspins vorgegeben ist. Dabei ist auch zu beobachten, dass offenbar der am schwächsten an den Zentralspin koppelnde Kernspin am meisten Polsarisation aufnimmt. Anschaulich ist das sofort klar, da das Übertragen der Polarisation auf diesen Spin energetisch am günstigsten ist. Langfristig nimmt die Elektronpolarisation einen Gleichgewichtswert an, um welchen lediglich Fluktuationen aufgrund der geringen Größe des Modellsystems zu beobachten sind. Die Kernspins hingegen weisen neben diesen Fluktuationen eine deutlich erkennbare Oszillation um ihren jeweiligen Gleichgewichtswert auf. Im Gleichgewichtszustand des Systems nimmt also lediglich der Zentralspin einen konstanten Wert an, während jeder Badspin im Feld des Elektrons präzediert. Es finden also ständig Flip-Flop-Prozesse statt, deren Effekt sich für das Elektron effektiv herausmittelt. Dieser Prozess ist darauf zurückzuführen, dass hier kein äußeres Magnetfeld für eine Zeemanenergie sorgt, welche die Spinflips unterdrücken würde. Hier kosten die Flips daher keine Energie und finden somit permanent statt. Diese Dynamik deutet auch an, weshalb die zuvor besprochene analytische Lösung funktioniert. Die Kernspindynamik ist nämlich nicht wirklich eingefroren, wie zu Beginn von Kapitel 7.3 angenommen wurde, sondern sie mittelt sich effektiv heraus, was denselben Effekt zur Folge hat.

7.3.4 Heisenbergsche Bewegungsgleichung

Nach der Diskussion des tatsächlichen Verhaltens des effektiven Magnetfelds, wird nun die Heisenbergsche Bewegungsgleichung für die Zentralspinpolarisation herangezogen, um genauer zu verstehen, weshalb die vorgestellte MF-Näherung so gut funktioniert. Für die Bewegungsgleichung ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle S^{z}(t)\right\rangle = i\left\langle \left[H,S^{z}\right]\right\rangle \tag{7.10}$$

$$= \langle S^{y}I^{x} \rangle - \langle S^{x}I^{y} \rangle, \qquad (7.11)$$

worin die Abkürzung $I^{\alpha} = \sum_{k} A_k I_k^{\alpha}$ mit $\alpha \in \{x, y, z\}$ verwendet wird. Die zeitliche Änderung von $\langle S^z \rangle$ ist demnach also durch die Differenz der Korrelationsfunktionen $\langle S^y I^x \rangle$ und $\langle S^x I^y \rangle$ gegeben, was einen exakten Ausdruck darstellt. Bildet man diesen Ausdruck analog für den MF-Hamiltonian, bei dem die Badoperatoren durch ihre Erwartungswerte ersetzt werden, so ergibt sich hingegen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left\langle S^{z}(t) \right\rangle_{\mathrm{MF}} = \left\langle S^{y} \right\rangle \left\langle I^{x} \right\rangle - \left\langle S^{x} \right\rangle \left\langle I^{y} \right\rangle.$$
(7.12)

Es deutet sich also an, dass eine MF-Beschreibung eine sinnvolle Näherung der Systemdynamik liefern kann, wenn die Korrelationsfunktionen $\langle S^y I^x \rangle$ und $\langle S^x I^y \rangle$ in ihre Einzelerwartungswerte faktorisieren. Für eine durch den Dichteoperator (6.11) beschriebene Anfangskonfiguration zeigt Abbildung 7.7 die genannten Korrelationsfunktionen zusammen mit der entsprechenden Faktorisierung. Wie bereits zu erwarten war zeigt sich, dass die Produkte der Einzelerwartungswerte in diesem Fall für alle Zeiten sehr nahe bei 0 liegen und eine MF-Beschreibung somit nicht adäquat zu sein scheint. Dieser Sachverhalt ist jedoch wenig überraschend. In Abschnitt 7.3 wurde nämlich angenommen, dass die Kernspins zusammengenommen ein effektives Magnetfeld liefern, das in eine beliebige Richtung zeigt und durch eine Gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung beschrieben werden kann. Legt man dem System jedoch ein statistisches Gemisch zu Grunde, bei dem das Bad vollständig unpolarisiert ist, so ist das effektive Magnetfeld zu Beginn gleich 0. Bildet man aber die Heisenbergsche Bewegungsgleichung eines Badoperators im Rahmen der MF-Theorie so ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left\langle I_k^{\alpha} \right\rangle_{\mathrm{MF}} = i \left\langle [H_{\mathrm{MF}}, I_k^{\alpha}] \right\rangle = 0, \tag{7.13}$$

sodass das effektive Magnetfeld in diesem Fall also offenbar permanent den Wert 0 behält und eine MF-Beschreibung hier somit keinen Sinn machen kann. Um nun der Grundannahme der analytischen Lösung näher zu kommen, besinnen wir uns darauf, dass das effektive Magnetfeld als Summe der einzelnen magnetischen Momente der Kerne zu verstehen ist. Da in Form des statistischen Gemischs über den einzelnen Kern



Abbildung 7.7: Gezeigt sind die Korrelationsfunktionen der Gestalt $\langle S^{\alpha}I^{\beta}\rangle$ im Vergleich zu ihrer zugehörigen Faktorisierung. Erneut ist die Beschriftung der *y*-Achse durch die Legende gegeben und das System enthält 18 Badspins, die in Form eines Gemischs vorliegen.

keinerlei Information vorlag, wurde die Bildung einer Summe über viele zufällige Kernspinorientierungen nicht berücksichtigt. Um diesen Aspekt jedoch hinzuzuziehen wird die Ausgangssituation nun erneut durch einen zufällig generierten Produktzustand, wie in (6.13) beschrieben. Bei dieser Konstruktion der Zustände erhält schließlich jeder einzelne Badspin eine zufällige Richtung, sodass der gesamte Produktzustand ein effektives Magnetfeld zusammengesetzt aus mehreren kleinen magnetischen Momenten generiert. Mittelt man nun die Zeitentwicklung von $\langle S^z(t) \rangle$ über einige Messungen mit verschiedenen Produktzuständen der einzelnen Spins, so dürfte die Lösung M(t) ebenfalls reproduziert werden, wie schon in Kapitel 6 besprochen und zudem dürfte die MF-Beschreibung des Systems auch durch die Heisenbergsche Bewegungsgleichung fundiert werden. In Abbildung 7.8 ist das Resultat dieser Herangehensweise für 50 Messungen und 16 Badspins im Vergleich zu M(t) und dem Ergebnis für ein statistisches Gemisch gezeigt. Es zeigt sich, dass die zuvor erzeugten Resultate in guter Übereinstimmung mit der Mittelung über 50 Produktzustände stehen. Die Dynamik des Zentralspins wird also hinreichend reproduziert. Es bleibt also die Frage ob hier die Faktorisierung der Korrelationsfunctionen $\langle S^{\alpha}I^{\beta}\rangle \approx \langle S^{\alpha}\rangle \langle I^{\beta}\rangle$ in guter Näherung gegeben ist und somit die MF-Beschreibung gerechtfertigt ist. Abbildung 7.9 beinhaltet die genannten Korrelationsfunktionen und die Produkte der einzelnen Erwartungswerte. Im Gegensatz zu den Resultaten bei denen die Kernspins in einem Gemisch vorlagen, ist zu erkennen, dass die Produkte der Erwartungswerte einen ähnlichen Verlauf wie die Korrelationsfunktionen aufweisen. Insbesondere übereinstimmen die Nulldurchgänge und Extrema



Abbildung 7.8: Hier sind die analytische Lösung M(t) und zwei numerische Resultate gegenübergestellt. Für das erste wird die Systemkonfiguration durch ein Gemisch beschrieben und für das zweite wurde eine Mittelung über 50 verschiedene Produktzustände des Systems gebildet.



Abbildung 7.9: Die Korrelationsfunktionen der Form $\langle S^{\alpha}I^{\beta}\rangle$ im Vergleich zu ihrer Faktorisierung, wobei eine Mittelung über 50 verschiedene Konfigurationen gebildet wurde, die jeweils durch einen zufälligen Produktzustand gegeben sind. Die Legende ersetzt die *y*-Achsenbeschriftung.

der Kurven fast exakt, jedoch ist die Amplitude der Faktorisierungen wesentlich kleiner. Dennoch wird durch diese Ergebnisse deutlich, dass die MF-Näherung für dieses Problem gerechtfertigt ist, solange eine Mittelung über einige Messungen durchgeführt wird, denen jeweils ein zufällig gebildeter Produktzustand zu Grunde liegt.

7.3.5 Numerische Umsetzung der MF-Näherung

In diesem Abschnitt wird diskutiert, wie die zuvor analytisch erzeugten MF-Resultate auf numerischer Ebene reproduziert werden können. Dieser Schritt wird vorgenommen, da später die Validität der MF-Näherung unter Hinzunahme eines externen Magnetfeldes diskutiert werden soll. Auf diese Art sind schließlich beliebige Feldstärken einfach zugänglich und es kann direkt geprüft werden ob die exakten Ergebnisse prinzipiell auch auf MF-Niveau erzeugt werden können. Im vorigen Abschnitt wurde motiviert, dass ein numerischer Ansatz für die MF-Näherung auf einer Mittelung über eine Vielzahl klar definierter Kernspinkonfigurationen basieren sollte. Daher werden nun die Erwartungswerte $\langle \vec{I}_k \rangle$ schlicht durch klassische Spinvektoren der Länge $\frac{1}{2}$ ersetzt, deren Ausrichtung anfangs zufällig bestimmt und für die gesamte Zeitentwicklung konstant gehalten wird. $H_{\rm MF}$ wirkt nun ausschließlich im Hilbertraum des Zentralspins und ist somit ein 2×2-dimensionaler Operator. Dieser lässt sich problemlos diagonalisieren, was die Eigenzustände $|E_1\rangle = (x_1, y_1)^T$ und $|E_2\rangle = (x_2, y_2)^T$, sowie die zugehörigen Eigenwerte liefert. Durch eine Linearkombination dieser lässt sich dann der Anfangszustand darstellen:

$$|\psi_0\rangle = |\Uparrow\rangle = \alpha |E_1\rangle + \beta |E_2\rangle \tag{7.14}$$

$$\implies \alpha = \left(x_1 - \frac{y_1}{y_2}x_2\right)^{-1}, \qquad \beta = \left(x_2 - \frac{y_2}{y_1}x_1\right)^{-1}.$$
 (7.15)

Somit lautet die Zeitentwicklung der Zentralspinpolarisation



Abbildung 7.10: Vergleich der analytischen gewonnenen Kurve M(t) mit dem numerisch gewonnenen MF-Resultat. Zusätzlich ist noch das Ergebnis für das Box-Modell gezeigt, wobei N = 16 Badspins berücksichtigt wurden, die in Form eines Gemischs vorliegen.

$$\langle S^{z}(t) \rangle = |\alpha|^{2} \langle E_{1} | S^{z} | E_{1} \rangle + |\beta|^{2} \langle E_{2} | S^{z} | E_{2} \rangle + \alpha^{*} \beta e^{i(E_{1} - E_{2})t} \langle E_{1} | S^{z} | E_{2} \rangle + \alpha \beta^{*} e^{-i(E_{1} - E_{2})t} \langle E_{2} | S^{z} | E_{1} \rangle,$$
 (7.16)

was eine kohärente Oszillation darstellt, deren Amplitude und Frequenz je nach Realisation des effektiven Kernmagnetfeldes variiert. Das gewünschte MF-Resultat ergibt sich dann aus einer Mittelung vieler Zeitentwicklungen, denen jeweils unterschiedliche Kernspinkonfigurationen und somit verschiedene Hamiltonoperatoren zugrundeliegen. Abbildung 7.10 zeigt ein auf diese Weise erzeugtes Ergebnis, für $N = 5 \cdot 10^4$ Badspins und eine Mittelung über 10^6 zufällig bestimmte effektive Magnetfelder zusammen mit der analytischen Kurve M(t) und der exakten Simulation für 16 Spins. Es ist zu erkennen, dass das numerische MF-Resultat die Analytik fast exakt reproduziert. Somit ist es uns möglich die MF-Näherung auf numerischer Ebene auf Systeme mit externem Magnetfeld zu übertragen und so durch Simulationen zu prüfen, ob die MF-Betrachtung auch für diesen Fall sinnvolle Ergebnisse liefert. Dies stellt eine interessante Fragestellung dar, da zuvor bereits festgestellt wurde, dass die MF-Näherung gerade aufgrund der bisher fehlenden Zeeman-Energie, welche Spinflips unterdrücken würde, gut funktioniert. Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass für die MF-Rechnung eine sehr große Anzahl Badspins verwendet wurde, um der analytischen Kurve möglichst nah zu kommen, da letzterer der Limes $N \to \infty$ zu Grunde liegt. Abbildung 7.11 zeigt wie sich



Abbildung 7.11: Vergleich von M(t) mit numerischen MF-Resultaten für aufsteigende Badgröße. Gezeigt ist lediglich der Bereich direkt um das anfangs auftretende Minimum der Kurven, um die Konvergenz der Methode zu verdeutlichen.

die MF-Ergebnisse mit wachsendem N verhalten. Es ist zu erkennen, dass sich diese Resultate von unten her an die analytische Kurve annähern, was im Gegensatz zu der Konvergenz des zuvor verwendeten Box-Modells steht, wo eine Annäherung von oben stattfand.

7.4 Frequenzspektrum

In diesem Kapitel soll nun noch das Frequenzspektrum der zuvor besprochenen, zeitabhängigen Dynamik betrachtet werden. Zunächst einmal lässt sich die Fourier-Transformation der Funktion M(t) berechnen:

$$M(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{-i\omega t} \frac{S_0^z}{3} \left[1 + 2 \left(1 - \left(\frac{t}{2T^*} \right)^2 \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{t}{2T^*} \right)^2} \right]$$
(7.17)

$$= \frac{S_0^z}{3} \left[2\pi \delta(\omega) + \omega^2 (\sqrt{8}T^*)^3 \sqrt{\pi} e^{-2(\omega T^*)^2} \right].$$
(7.18)

Zum einen ergibt sich also ein Delta-Peak bei $\omega = 0$, das von der durch die Anfangsbedingungen festgelegten endlichen Polarisation im System und dem damit einhergehenden Gleichgewichtswert von $\langle S^z(t) \rangle$ herrührt. Den interessanteren Teil des Frequenzspektrums stellt jedoch der zweite Term der analytischen Vorhersage dar. In Kapitel 6 wurde gezeigt, dass $\langle S^z(\omega) \rangle$ für einheitliche Kopplungskonstanten durch eine endliche Anzahl Frequenzen beschrieben werden kann, die durch die Badgröße und die Kopplungsstärke vorgegeben sind. Für $N \to \infty$ ergibt sich entsprechend ein Kontinuum, das durch den rechten Teil von Gleichung (7.18) beschrieben wird. In Abbildung 7.12 wird



Abbildung 7.12: Das numerisch berechnete Frequenzspektrum für N = 12 bis N = 18Badspins im Vergleich zur analytischen Vorhersage für $N \to \infty$. Es sind lediglich positive Frequenzen gezeigt, da das Spektrum in allen Fällen symmetrisch zur *y*-Achse ist. Darin ist $\Delta E = E_{\text{max}} - E_{\text{min}}$.

 $M(\omega)$ den numerischen Resultaten für $\langle S^z(\omega) \rangle$ bei verschiedenen Badgrößen gegenübergestellt. Für das Spektrum endlicher Systeme ergibt sich wie erwartet eine Verteilung einzelner Peaks, deren Höhe zumindest grob dem Verlauf der analytischen Kurve entspricht. Für zunehmende Systemgröße ergibt sich eine gleichmäßiger werdende Aufteilung der Peaks, was bedeutet, dass stark nach oben ausreißende Maxima unterdrückt



Abbildung 7.13: Gezeigt ist die Integration über die in Abbildung 7.12 gezeigten Daten.

werden und sich eine bessere Annäherung an die Analytik andeutet. Ob die Resultate jedoch tatsächlich übereinstimmen ist der direkten Analyse der $\langle S^z(\omega) \rangle$ nicht zu entnehmen. Ein Ansatz zum Schaffen einer besseren Vergleichbarkeit der beiden Resultate wäre, eine Mittelung über viele verschiedene Realisationen der Kopplungskonstanten A_k durchzuführen, in der Hoffnung, dass die Effekte, die aufgrund der geringen Systemgröße entstehen, sich herausmitteln. Setzt man dies jedoch in die Tat um, so zeigt sich dass die einzelnen Peaks zwar etwas breiter und flacher werden, jedoch entsteht dabei ebenfalls keine glatte Kurve, die direkt mit dem analytischen Resultat vergleichbar wäre. Es stellt sich somit als praktischer heraus die Resultate zu vergleichen, indem man über die jeweiligen Daten integriert. Daraus ergeben sich in diesem Fall die in Abbildung 7.13 gezeigten Resultate. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen der Simulation und $M(\omega)$. Ausserdem ist auch zu sehen, dass für größer werdende Systeme die Annäherung an die kontinuierliche Vorhersage zunimmt. Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass das Vorgehen zum Erstellen der beiden gezeigten Abbildungen eigentlich umgekehrt war als beschrieben. Es wurde nämlich erst das simulierte Spektrum integriert, dann die Stammfunktion von $M(\omega)$ mit den erhaltenen Daten verglichen und an diese angepasst. Das anpassen ist von Nöten, da mit zunehmender Systemgröße jeweils ein leicht unterschiedlicher Verlauf des integrierten Spektrums entsteht, was auch auf die unterschiedliche Energieskala zurückzuführen ist. Daraufhin wurde die Ableitung der angepassten Stammfunktion zusammen mit den ursprünglichen Daten aufgetragen.

8 Dynamik im externen Magnetfeld

In diesem Kapitel wird den bisherigen Betrachtungen ein externes Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_x$ hinzugefügt. Die Beschränkung auf ein äußeres Feld entlang der *x*-Richtung ist durch die in Kapitel 2 angesprochene Voigt-Geometrie motiviert, welche in vielen Experimenten verwendet wird. Hier wird neben den interessanten Effekten im exterenen Feld, wie schon angedeutet wurde, auch diskutiert, ob die im vorigen Kapitel beschriebene MF-Näherung auch für den magnetfeldbehafteten Fall nützlich ist. Ansätze zu einer ähnlichen MF-Herangehensweise im externen Magentfeld wurden beispielsweise von S. I. Erlingsson und Y. V. Nazarov veröffentlicht [32] [33], welche den hier durchgeführten Betrachtungen jedoch nicht direkt zugrundeliegen. Auf Modellebene wird nun also ein Magnetfeld in *x*-Richtung hinzugefügt und somit der Hamiltonoperator

$$\tilde{H}_2 = T^* \omega_L S^x + T^* \sum_{k=1}^N A_k \vec{S} \cdot \vec{I}_k$$
(8.1)

diskutiert. Ein entscheidender Unterschied gegenüber den vorigen Betrachtungen ohne Magnetfeld ist, dass der Gesamtspin entlang der z-Achse S_{ges}^z aufgrund des ersten Terms des Hamiltonoperators nicht mehr erhalten ist. Es ist somit nun möglich, dass alle im System vorhandene Polarisation verloren geht. Ausserdem ist nun nicht mehr zu erwarten, dass die verwendete Zeitskala T^* die Kurzzeitdynamik des Systems invariant lässt. Betrachtet man nämlich erneut Gleichung (3.13) mit dem neuen Hamiltonoperator $\frac{\tilde{H}_2}{T^*}$, so ergibt sich nun

$$\langle S^{z}(t) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{t}{T^{*}} \right)^{2} - \left(\frac{\omega_{L} t}{2} \right)^{2} + O(t^{3}),$$
(8.2)

sodass auch die Larmorfrequenz maßgeblich für die Kurzzeitentwicklung ist. Im Folgenden soll zunächst der Fall eines starken äußeren Magnetfeldes, wie es in vielen Experimenten realisiert ist, analysiert und später auf geringe Feldstärken eingegangen werden.

8.1 Starkes äußeres Feld

Betrachtet man einen einzelnen, entlang der z-Achse polarisierten Spin im externen Magnetfeld in x-Richtung, so ist sofort ersichtlich, dass dieser eine Präzession mit der Frequenz ω_L um die Feldachse ausführt. Dabei handelt es sich um eine kohärente Dynamik, welche jedoch durch das Einführen eines Spinbades zerstört wird. In Abbildung 8.1 ist die Zeitentwicklung der Zentralspinpolarisation bei aufsteigender Systemgröße



Abbildung 8.1: Abgebildet ist die mittels der Chebyshev-Polynomentwicklung gewonnene Zeitentwicklung der Zentralspinpolarisation für Systeme mit aufsteigender Anzahl Badspins N. Die stärke des Magnetfeldes entlang der x-Achse ist hier für alle Kurven durch $b = \frac{\omega_L}{A} = 2$ gegeben.

Nfür ein externes Magnetfeld gezeigt, dessen Stärke durch den Parameter $b=\frac{\omega_L}{A}$ gegeben ist. Dieser wird verwendet, da er zum einen dimensionslos ist und zum anderen direkten Aufschluss darüber gibt, ob bei der betrachteten Konfiguration der Einfluss der Hyperfeinwechselwirkung oder des externen Feldes dominiert. Es ist zu erkennen, dass die Elektronpolarisation rapide auf den Wert 0 abfällt und nach einiger Zeit ein Revival-Effekt zu erkennen ist. Letzterer tritt jedoch mit wachsender Systemgröße zunehmend schwächer und nach längerer Zeit auf, sodass es sich dabei offensichtlich um einen Prozess handelt, der auf die geringe Systemgröße zurückzuführen und somit in der Praxis uninteressant ist. Wie zu erkennen ist, ist er bereits bei einem System mit 20 Badspins kaum noch auszumachen. Folglich wird fortan lediglich der initiale Zerfallsprozess betrachtet. Wie eingangs erwähnt, wäre ohne die Kernspins schlicht eine kohärente Oszillation mit der Frequenz ω_L zu beobachten, durch das Ankoppeln des Bades ist nun jedoch das Auftreten von Dekohärenz zu erkennen. Nun stellt sich die Frage wie genau der Polarisationszerfall von statten geht. So geht aus der Abbildung nicht genau hervor, ob der Zeitraum in dem $\langle S^z(t) \rangle$ von $\frac{1}{2}$ auf 0 abfällt unter Verwendung der Zeitskala T^* invariant ist oder nicht, jedoch deutet sich die Invarianz an. Erwähnenswert ist noch die Tatsache, dass bei genauem Hinsehen ein Anwachsen der Oszillationsfrequenz im Vergleich zwischen den einzelnen Kurven erkennbar ist. Dies ist auf die, in Abbildung 8.1, einheitliche Wahl von $b = \frac{\omega_L}{A} = 2$ zurückzuführen, da hier für wachsende Badgröße die Gesamtkopplung A und somit auch die Larmorfrequenz ansteigt. Abbildung 8.2 behandelt die Kurzzeitentwicklung von $\langle S^{z}(t) \rangle$ in Hinblick auf



Abbildung 8.2: Kurzzeitentwicklung der Zentralspinpolarisation für N = 16 und aufsteigende Magnetfelddstärke b in x-Richtung, inklusive der Funktion $f(t) = \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{8} \left(\frac{t}{T^*}\right)^2}$, welche die Signaleinhüllende approximiert. Die Legende ersetzt hier die Beschriftung der y-Achse.

die Zeitskala T^* . Die darin eingezeichnete Funktion

$$f(t) = \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{8} \left(\frac{t}{T^*}\right)^2}$$
(8.3)

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{8} \left(\frac{t}{T^*}\right)^2 + O(t^3) \tag{8.4}$$

ist durch Gleichung (3.20) motiviert, da ihre Reihenentwicklung für $\frac{t}{T^*} \ll 1$ exakt die dort vorhergesagte Form aufweist. Prinzipiell existiert natürlich eine Vielzahl an Funktionen mit dieser Eigenschaft, jedoch erinnert der Polarisationszerfall auf den ersten Blick an eine Gaußfunktion, sodass hier diese als Ansatz gewählt wurde. Es ist zu erkennen, dass f(t) in guter Näherung die Einhüllende des Ergebnisses für $\langle S^z(t) \rangle$ bildet und zwar unabhängig von der jeweiligen Feldstärke. Für ein starkes externes Magnetfeld senkrecht zur Spinpolarisation ergibt sich also, dass das zu Grunde legen der Zeitskala T^* zwar nicht mehr den Verlauf von $\langle S^z(t) \rangle$ für kurze Zeiträume invariant lässt, nun jedoch die Einhüllende des resultierenden Signals unverändert bleibt. Die Erklärung für dieses Verhalten liegt darin, dass die Elektronspindynamik nun zwar durch das starke Magnetfeld dominiert wird, jedoch das Auftreten von Dekohärenz rein auf die Hyperfeinwechselwirkung zurückzuführen ist und somit die in Zusammenhang mit dieser Wechselwirkung abgeleitete Zeitskala T^* den Polarisationszerfall nach wie vor beschreibt. Es sei noch betont, dass die Funktion f(t) hier nur dazu dient, das invariante Kurzzeitverhalten des Systems herauszustellen. Sie gibt jedoch keineswegs



Abbildung 8.3: Die Abweichung $\Delta := f(t) - \langle S^z(t) \rangle$ der geratenen Funktion f(t) von dem tatsächlichen Zerfall der Zentralspinpolarisation. Die Messpunkte wurden jeweils nur an den Maxima der Oszillation genommen, welche durch den Index n durchnummeriert werden. n = 0 bezeichnet dabei das Maximum bei t = 0. Gezeigt ist das Resultat für N = 16 und b = 8.

den genauen Polarisationszerfall wider. Um die Abweichung von f(t) und der exakten Signaleinhüllenden zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 8.3 die Größe

$$\Delta := f(t) - \langle S^z(t) \rangle \tag{8.5}$$

an den Maxima der zu beobachtenden Oszillation. Es ist zu erkennen, dass die zu Beginn bei 0 liegende Abweichung mit der Zeit langsam anwächst und gegen Ende wieder abnimmt, wobei das spätere Zusammenlaufen der Kurven offensichtlich ist, da beide schnell gegen 0 gehen. Somit ist geklärt, dass der genaue Verlauf der Einhüllenden von $\langle S^z(t) \rangle$ nicht durch f(t) gegeben und die tatsächliche Lösung des Problems nicht bekannt ist. Zu Abbildung 8.3 ist noch anzumerken, dass Δ für n = 0 nicht wirklich genau 0 ist, sondern aufgrund der in die Simulation eingehenden stochastischen Spurauswertung eigentlich ein Fehler der Größenordnung 10⁻³ auftritt. Dieser wurde für die Darstellung der Daten schlicht allen Messpunkten abgezogen, wodurch die tatsächliche Kurve so entlang der y-Achse verschoben wurde, dass sie der Anschaulichkeit halber bei $\Delta = 0$ beginnt.

8.1.1 Wirksamkeit der MF-Betrachtung

Die in Abschnitt 7.3.5 beschriebene MF-Näherung lässt sich problemlos auf den magnetfeldbehafteten Fall übertragen, indem dem dort verwendeten Hamiltonoperator schlicht der Term

$$\tilde{H}_{B^x} = T^* \omega_L S^x \tag{8.6}$$

hinzugefügt und die Berechnung der Zeitentwicklung genauso wie zuvor durchgeführt wird. Abbildung 8.4 zeigt ein auf diese Art erzeugtes MF-Resultat im Vergleich mit



Abbildung 8.4: Die Simulationsergebnisse des Box-Modells im Vergleich zur numerisch umgesetzten MF-Näherung im starken Magnetfeld entlang der x-Achse. Für beide Rechnungen ist N = 16 und b = 2.

einem mittels der Chebyshev-Entwicklung gewonnnenem Ergebnis. Es ist zu erkennen, dass beide Kurven zunächst sehr gut übereinstimmen und im Verlauf des Abklingens der Polarisation geringfügig auseinanderlaufen. Dieser Effekt ist jedoch auf die Konvergenzeigenschaft der MF-Methode zurückzuführen. Wie nämlich in Abbildung 7.11 zu erkennen ist, produziert die MF-Simulation für kleine Badgrößen einen geringfügig schnelleren Polarisationszerfall, als die Lösung für $N \to \infty$. Die Resultate für ein größeres Magnetfeld als das in Abbildung 8.4 gezeigte, mit b = 2, liefern äquivalente Ergebnisse. Insgesamt zeigt sich demnach, dass das Anwenden der MF-Näherung für große Feldstärken sinnvoll ist, da die exakten Daten auf MF-Ebene reproduziert werden.

8.2 Geringe Magnetfeldstärke

Im vorigen Abschnitt wurde der Fall diskutiert, in dem das äußere Magnetfeld entlang der x-Achse die Systemdynamik zwar klar dominiert, jedoch die Hyperfeinwechselwirkung für das Auftreten von Dekohärenz in der Zeitentwicklung sorgt. Nun soll das Regime eines schwachen äußeren Feldes beleuchtet werden, in dem das externe Feld klein gegenüber der gesamten Hyperfeinkopplung ist. Abbildung 8.5 zeigt $\langle S^z(t) \rangle$ für verschiedene Feldstärken b in einem System mit 16 Kernspins. Es ist klar zu erkennen, dass der anfängliche Polarisationszerfall in diesem Regime im wesentlichen verläuft wie im magnetfeldfreien Fall. Die Kurzzeitdynamik bleibt also durch die Hyperfeinwechselwirkung dominiert, jedoch ist zu sehen, dass sich das initiale Polarisationsminimum mit zunehmender Feldstärke nach unten verschiebt und nach zunehmend kurzer Zeit erreicht wird. Dieser Effekt ist aufgrund des Resultats (8.2) wenig überraschend, da ω_L offenbar direkt in den kurzfristigen Polarisationsabfall eingeht. In Anschluss an den initialen Zerfall, stellt sich hier im Gegensatz zum feldfreien Fall offenbar kein Gleichgewichtswert bei einer endlichen Polarisation ein. Stattdessen ist zu beobachten,



Abbildung 8.5: Zeitentwicklung der Zentralspinpolarisation im schwachen Magnetfeld entlang x, wobei $b = \frac{\omega_L}{A}$ erneut die Feldstärke misst und ein System mit N = 16 Badspins gewählt wurde.

dass $\langle S^z(t) \rangle$ unimtelbar nach durchlaufen des, für b = 0 typischen, Minimums abfällt, wobei der Gradient dieser Flanke für wachsende Feldstärke ansteigt. Aus Abbildung 8.5 scheint hervorzugehen, dass die Polarisation daraufhin einen Nulldurchgang aufweist, vorübergehend ins negative fällt und anschließend gegen den Gleichgewichtswert 0 strebt. Betrachtet man jedoch die Langzeitentwicklung des Problems, welche in Abbildung 8.6 gezeigt ist, wird klar, dass dies nicht der Fall ist. Stattdessen ist zu beobachten, dass sich langfristig eine präzessionsähnliche Dynamik um die x-Achse einstellt, deren Frequenz offenbar von der Magnetfeldstärke b abhängt. Es ist nicht offensichtlich worauf dieses Verhalten zurückzuführen ist. Aus dem vorigen Kapitel ist bekannt, dass sich ohne externes Feld langfristig eine feste Gleichgewichtspolarisation ausbildet. Zudem haben wir im vorigen Abschnitt gesehen, dass für ein, gegenüber der Hyperfeinkopplung dominantes äußeres Feld bereits nach kurzer Zeit keine Restpolarisation mehr im System vorhanden ist. Für geringe Feldstärken, also im Bereich des Übergangs zwischen den Extremfällen ohne jegliches hin zum starken Magnetfeld, zeigt sich dagegen nun, dass langfristig noch eine endliche Gleichgewichtspolarisation im System verbleibt, welche dann durch das schwache äußere Feld nicht konstant bleibt, sondern eine unsystematisch wirkende Dynamik zeigt. Dies wird insbesondere durch den in Abbildung 8.6 gezeigten Erwartungswert $\langle S^{y}(t) \rangle$ deutlich, welcher ohne äußeres Feld noch permanent gleich 0 war. Zudem ist insbesondere zwischen b = 0.1 und b = 0.2 eine deutliche Abnahme der Signalamplitude zu erkennen, was die sinkende Restpolarisation spiegelt. Zwischen dem, durch die Hyperfeinwechselwirkung geprägten, Kurzzeitverhalten und der, sich nach langer Zeit einstellenden Dynamik der Gleichgewichtspolarisation zeigt der Zentralspin ein recht kompliziertes Verhalten, welches schwer zu deuten ist. Für weiter wachsende Feldstärken beobachtet man schnell das Wegfallen der langfristigen Effekte, jedoch bleibt das unklare mittelfristige Verhalten zunächst erhalten und tritt erst für dominierende äußere Felder nicht mehr auf.



Abbildung 8.6: Die Langzeitentwicklung von $\langle S^z(t) \rangle$ und $\langle S^y(t) \rangle$ für verschiedene schwache Felder. Erneut wurde ein System mit N = 16 Badspins simuliert. Die Legende ersetzt die Beschriftung der *y*-Achse.



Abbildung 8.7: Vergleich der MF-Ergebnisse mit den exakten Simulationen für ein System mit 16 Badspins. b gibt die Magnetfeldstärke entlang der x-Achse an.

8.2.1 Wirksamkeit der MF-Betrachtung

Für den Fall eines starken Magnetfeldes senkrecht zur Zentralspinpolarisation lieferte die MF-Näherung gute Resultate. Abbildung 8.7 zeigt auf MF-Ebene gewonnene Ergebnisse für geringe und mittlere Feldstärken im Vergleich zu den entsprechenden, mittels der Chebyshev-Entwicklung gewonnenen Kurven. Es ist deutlich zu erkennen, dass die MF-Betrachtung für geringe bis mittelstarke Felder senkrecht zur Spinpolarisation nicht funktioniert. Es kann lediglich das Kurzzeitverhalten von $\langle S^{z}(t) \rangle$ sinnvoll beschrieben werden, jedoch stellt sich bei der MF-Herangehensweise immer nach relativ kurzer Zeit ein endlicher Gleichgewichtswert ein. Die langfristigen, mit dem Magnetfeld verbundenen Effekte können also offenbar nicht reproduziert werden. Insgesamt zeigt sich also, dass die MF-Näherung zwar in jedem Fall das Kurzzeitverhalten des Zentralspins korrekt vorhersagt, jedoch versagt sie für den schwierigen Fall, dass der Einfluss der Hyperfeinkopplung nicht durch ein wesentlich stärkeres äußeres Feld dominiert wird. Somit sind im Allgemeinen exakte Simulationen von Nöten, um die zeitabhängige Dynamik des hier betrachteten Systems zu studieren, da die durchgeführten Simulationen zeigen, dass eine analytische Lösung auf MF-Ebene, wie sie für den magnetfeldfreien Fall in Abschnitt 7.3 abgeleitet wurde, mit vorhandenem Magnetfeld nicht in allen Regimen funktioniert.

8.3 Frequenzspektrum

Zur Darstellung der Frequenzspektren im schwachen und starken äußeren Feld entlang der x-Achse stellt sich zunächst die Frage, welche Größe ein sinnvolles Maß zur Skalierung der Frequenzachse darstellt. Für dominante äußere Feldstärken bietet sich für diesen Zweck die Larmorfrequenz ω_L an. Bei dieser Wahl würde mit abgeschalteter Hyperfeinwechselwirkung schließlich lediglich jeweils ein Detla-Peak bei $\tilde{\omega} = \frac{\omega}{\omega_L} = \pm 1$ auftreten und somit ist klar, dass für einen sehr geringen Einfluss der Hyperfeinkopplung ein Spektrum resultieren muss, das außer im Bereich nahe bei $\tilde{\omega} = \pm 1$ gleich null ist. Zur Skalierung die Größe $\tilde{\omega}$ heranzuziehen bietet jedoch offenbar keine gute Vergleichbarkeit zwischen starkem äußerem Feld und den Resultaten bei geringen Feldstärken, was insbesondere der Fall $\omega_L = 0$ direkt klar macht, da $\tilde{\omega}$ hier nicht definiert ist. Um eine Skala zu wählen die eine bessere Vergleichbarkeit liefert, ziehen wir für $\langle S^z(t) \rangle$ das Resultat aus Gleichung (8.2) heran und vergleichen es mit der Kurzzeitentwicklung eines Elektrons im Magnetfeld ohne angekoppeltes Spinbad $\langle S^z(t) \rangle_0$:

$$\langle S^{z}(t)\rangle = \frac{1}{2} - \frac{t^{2}}{4} \left(\frac{1}{2(T^{*})^{2}} + \omega_{L}^{2}\right) + O(t^{3})$$
(8.7)

$$\langle S^{z}(t) \rangle_{0} = \frac{1}{2} \cos(\omega_{L} t) = \frac{1}{2} - \left(\frac{\omega_{L} t}{2}\right)^{2} + O(t^{3}).$$
 (8.8)

Stellt man die Beiträge zweiter Ordnung in der Zeit für die reine Larmorpräzession und die Kurzzeitentwicklung mit Kernspinbad gegenüber, so zeigt sich, dass die kurzfristige

Systementwicklung durch Hinzunahme des Bades eine Korrektur an der Larmorfrequenz bewirkt, aus welcher wir eine neue Skalierung der Frequenzachse ziehen:

_

$$\omega_L \to \sqrt{\omega_L^2 + \frac{1}{2(T^*)^2}} \tag{8.9}$$

$$\Rightarrow \quad \omega' = \frac{\omega}{\sqrt{\omega_L^2 + \frac{1}{2(T^*)^2}}}.$$
(8.10)

Für den Limes $A_k \to 0$ und somit $T^* \to \infty$ übereinstimmt die Größe ω' gerade mit $\tilde{\omega}$, jedoch bietet erstere den entscheidenden Vorteil auch ohne äußeres Feld definiert zu sein und schafft somit eine gute Vergleichbarkeit der beiden Extremfälle. In Abbildung 8.8 sind Frequenzspektren für geringe und mittlere Magnetfeldstärken b gezeigt, denen ein System mit 16 Badspins zu Grunde liegt. Betrachtet man das Spektrum nahe $\omega' = 0$ so erkennt man, dass das Einführen eines Feldes in x-Richtung den dortigen Peak aufhebt. Diese Beobachtung ist schlicht auf die zuvor gezeigte Tatsache zurückzuführen, dass im hier betrachteten Fall für $b \neq 0$ keine endliche Gleichgewichtspolarisation im System verbleibt. Statt des Peaks bei $\omega' = 0$ entsteht jedoch dicht daneben ein deutlich ausgeprägtes Maximum, welches für alle in Abbildung 8.8 gezeigten Feldstärken



Abbildung 8.8: Gezeigt sind die direkt berechneten (s. Abschnitt 4.4) Frequenzspektren der Zentralspinpolarisation für aufsteigende Feldstärke $b = \frac{\omega_L}{A}$. Allen Rechnungen liegt ein System mit 16 Badspins zu Grunde. Die Skalierung der *x*-Achse erfolgt durch $\omega' = \frac{\omega}{\sqrt{\omega_L^2 + \frac{1}{2(T^*)^2}}}$.

klar erkennbar ist, jedoch mit zunehmendem Magnetfeld schrumpft. Dieses spiegelt die langfristige Oszillation mit geringer Frequenz wider, welche im vorigen Abschnitt für geringe Feldstärken beobachtet wurde. Für den übrigen Teil des Spektrums zeigt sich, dass sich die zuvor angesprochene Erwartung als wahr herausstellt. Es ist nämlich klar zu sehen, dass das für den feldfreien Fall noch breit verteilte Spektrum zunehmend stärker um den Wert $\omega' = 1$ herum fokussiert wird. Zudem ist für b = 1 bei der Larmorfrequenz bereits ein stark ausgeprägter Peak zu erkennen, welcher die Umliegenden deutlich übertrifft, während die Höhe der einzelnen Maxima für geringe Feldstärken noch recht gleichmäßig verteilt ist. Abbildung 8.9 zeigt das Frequenzspektrum $\langle S^z(\omega) \rangle$



Abbildung 8.9: Dargestellt ist $\langle S^z(\omega) \rangle$ für b = 8 und N = 16. Links ist der Vergleichbarkeit halber der gleiche Ausschnitt der Frequenzachse gezeigt wie in Abbildung 8.8, wobei hier ein doppelt so großer Wertebereich gewählt wurde. Rechts ist der auftretende Peak für b = 8 genauer aufgelöst abgebildet.

für ein starkes äußeres Feld (b = 8). Im linken Teil der Abbildung ist zu erkennen, dass sich der Trend aus Abbildung 8.8 erwartungsgemäß fortsetzt, indem der Peak nahe $\omega' = 0$ so weit abflacht, dass er nicht mehr zu sehen ist und das gesamte Spektrum lediglich eine einzelne Ausprägung bei $\omega' = 1$ aufweist. Diese ist im rechten Teil im Detail gezeigt. Es zeigt sich, dass durch das starke äußere Magnetfeld zwar nur noch ein breiter Peak auftritt, in dessen Flanken jedoch nach wie vor die einzelnen Maxima des Spektrums für geringere Feldstärken erkennbar sind. Zudem ist erwähnenswert, dass der auftretende Peak weder um die Larmor-Frequenz, noch um $\omega' = 1$ herum zentriert ist, sondern um eine größere, unbekannte Frequenz.

9 Fazit und Ausblick

Gegenstand dieser Arbeit war die Dephasierung eines angeregten Elektronspins in einem einzelnen HLQP, welche durch die Hyperfeinwechselwirkung mit den Spins der umgebenden Kerne induziert wird. Die theoretische Modellierung der Hyperfeinwechselwirkung erfolgte in Form eines Zentralspimodells, in das neben der Kopplung des Elektron- an die Kernspins noch ein externes Magnetfeld einging, das jedoch nur für das Elektron sichtbar war. Es wurde angegeben wie die Chebyshev-Polynomentwicklung genutzt werden kann, um die Zeitentwicklung eines Quantenzustands innerhalb dieses Modells zu berechnen und zudem eine Methode beschrieben, um direkt das Frequenzspektrum der daraus resultierenden Dynamik zu erhalten. Nach einem kurzen Test dieser numerischen Werkzeuge, wurde für den einfachen Fall einheitlicher Kopplungskonstanteneine eine exakte Lösung des Modells angegeben, die die Möglichkeit bietet sämtliche Basiszustände des Systems analytisch zu propagieren. Die Zeitentwicklung der Zentralspinpolarisation für beliebig komplizierte Anfangsbedingungen wurde in diesem Zusammenhang numerisch berechnet und ihre Vereinbarkeit mit der analytischen Lösung gezeigt.

Desweiteren wurde für beliebige Kopplungskonstanten eine Zeitskala T^* herausgearbeitet, die den Polarisationszerfall des Elektronspins sowohl mit, als auch ohne äußeres Feld beschreibt und dabei lediglich von Parametern des Systems abhängt. Es wurde eine MF-Lösung des vorliegenden Problems für den magnetfeldfreien Fall vorgestellt und deren Übereinstimmung mit den Simulationsdaten nachgewiesen. In diesem Zusammenhang wurde gezeigt, dass die numerischen Rechnungen, die auf einem Box-Modell mit nur etwa N = 20 Kernspins fußen, den Limes $N \to \infty$ bereits gut widerspiegeln. Zudem wurde klar gemacht, dass die genaue Realisation der Kopplungskonstanten für große Systeme keinen Einfluss auf die Systemdynamik hat, solange berücksichtigt wird, dass im realistischen Fall eine breite Verteilung der A_k vorliegt. Weiterhin wurde die gute Wirksamkeit der analytischen MF-Näherung diskutiert und eine simple numerische Methode entwickelt, um diese auch auf Simulationsebene anwenden zu können. Dieses Verfahren diente dann der Verallgemeinerung der MF-Betrachtung auf den magnetfeldbehafteten Fall, für den gezeigt wurde, dass die Systemdynamik für ein starkes externes Magnetfeld auf MF-Level reproduzierbar ist, dies jedoch nicht funktioniert, wenn das B-Feld und die Hyperfeinwechselwirkung in etwa gleich stark sind. In letzterem Regime treten jedoch verschiedene interessante Effekte auf, deren Behandlung bisher nur auf numerischer Ebene funktioniert.

Insgesamt kann die Untersuchung der Hyperfeinwechselwirkung in HLQPen im Rahmen dieser Arbeit als erfolgreich angesehen werden. Die wesentlichen Effekte sind verstanden und es ist davon auszugehen, dass diese prinzipiell auch für QPe von realistischem Ausmaß so gemessen werden könnten. Kritisch ist jedoch die Tatsache, dass in der Praxis im Allgemeinen kein einzelner QP vorliegt, sondern ein Ensemble von QPen. Daher ist interessant welche zusätzlichen Effekte für ein solches Ensemble auftreten, was eine Fragestellung zukünftiger Untersuchungen darstellen könnte.

Darüber hinaus spielen in HLQPen neben der Hyperfeinwechselwirkung auch andere Effekte eine Rolle, wie die Dipol-Dipol-Wechselwirkung oder die Elektron-Phonon-Kopplung. Ein Hinzufügen dieser Beiträge zu der hier behandelten Theorie stellt eine weitere interessante Aufgabe für die Zukunft dar. In diesem Zusammenhang ist auch zu betonen, dass für die Hinzunahme dieser Terme auch neues numerisches Werkzeug von Nöten sein könnte. Beispielsweise wäre die Implementierung der TD-NRG zur Simulation der Dynamik im Zentralspinmodell eine interessante Aufgabe für die Zukunft, da sie eine gute Basis zur Hinzunahme eines bosonischen Bades, wie den Phononen darstellen könnte. Neben den genannten Wechselwirkungen ist zu erwähnen, dass bei der Anregung von Elektronen in Ensembles von HLQPen auch Trionen entstehen, deren rapider Zerfall einen weiteren wichtigen Einfluss für die im Experiment gemessenen Signale darstellt.

Über das Hinzufügen weiterer Prozesse innerhalb der Quantenpunkte hinaus, ist zukünftig auch denkbar Untersuchungen zur kohärenten Kontrolle des Zentralspins durchzuführen, also den Einfluss von Pulsen auf das System zu untersuchen. Ziel dieser Betrachtungen wäre ein Verfahren zu entwickeln, um die Kohärenzzeiten des Systems in der Theorie zu maximieren und auf diese Weise Vorschläge für entsprechende experimentelle Herangehensweisen zu erarbeiten.

Außerdem existieren neben den hier beschriebenen experimentellen Ansätzen auch weitere interessante Experimente zu Elektronspins in HLQPen. Beispielsweise Messungen bei denen keine Anregung von Spins stattfindet, sondern Spinrauschen von Löchern im thermischen Gleichgewicht betrachtet wird [34]. Auch die Resultate dieser Experimentform sind soweit nicht vollständig verstanden und ein elementares Verständnis vom Rauschen in HLQPen zu gewinnen, stellt eine Interessante Fragestellung für die Zukunft dar.

Quellenverzeichnis

- M. Gaudin. Diagonalisation d'une classe d'hamiltoniens de spin. J. Phys. France, 37:1087 – 1098, 1976.
- [2] R. Hanson. Coherent dynamics of a single spin interacting with an adjustable spin bath. Science, 320:352–355.
- [3] Daniel Loss and David P. DiVincenzo. Quantum computation with quantum dots. Phys. Rev. A, 57:120–126, Jan 1998.
- [4] S. A. Wolf et al. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. Science, 294:1488–1495.
- [5] D. J. Reilly et al. Suppressing spin qubit dephasing by nuclear state preparation. Science, 321:817–821.
- [6] Michael Bortz and Joachim Stolze. Exact dynamics in the inhomogeneous centralspin model. Phys. Rev. B, 76:014304, Jul 2007.
- [7] Alexander V. Khaetskii, Daniel Loss, and Leonid Glazman. Electron spin decoherence in quantum dots due to interaction with nuclei. *Phys. Rev. Lett.*, 88:186802, Apr 2002.
- [8] J. Schliemann, A. Khaetskii, D. Loss. Electron spin dynamics in quantum dots and related nanostructures due to hyperfine interaction with nuclei. J. Phys.: Condens. Matter, 81:R1809 – R1833, 2003.
- [9] I. A. Merkulov, Al. L. Efros, and M. Rosen. Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, 65:205309, Apr 2002.
- [10] Alexander Khaetskii, Daniel Loss, and Leonid Glazman. Electron spin evolution induced by interaction with nuclei in a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 67:195329, May 2003.
- [11] H. Q. Lin. Exact diagonalization of quantum-spin models. Phys. Rev. B, 42:6561– 6567, Oct 1990.
- [12] Diplomarbeit: J. Jäger. Spin decoherence through a bath of nuclear spins. TU-Dortmund, Lehrstuhl für theoretische Physik II, 2011.
- [13] H. Tal-Ezer, R. Kosloff. An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent Schrödinger equation. J. Chem. Phys., 81:3967 – 3969, 1984.

- [14] L. Goldstein et al. Appl. Phys. Lett., 47, 1985.
- [15] I. N. Stranski, L. V. Krastanow. Abhandlungen d. Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse, 146, 1939.
- [16] J. Marquez et al. Atomically resolved structure of inas quantum dots. Appl. Phys. Lett., 87:1309 – 1311, 2001.
- [17] Dissertation: T. Auer. The Electron-Nuclear Spin System in (In,Ga)As Quantum Dots. TU-Dortmund, Lehrstuhl für experimentelle Physik 2, 2008.
- [18] Dissertation: S. Spatzek. Kohärente Kontrolle und Wechselwirkung von Elektronenspins in einem (In,Ga)As/GaAs Quantenpunktensemble. TU-Dortmund, Lehrstuhl für experimentelle Physik 2, 2011.
- [19] Diplomarbeit: M. Wiemann. Kohärente Spinkontrolle in (In,Ga)As/GaAs Quantenpunkten und Quantenschichten. TU-Dortmund, Lehrstuhl für experimentelle Physik 2, 2007.
- [20] http://www.e2.physik.tu-dortmund.de/research/research-groups-e2a/spindynamics2. 2012.
- [21] E. Fermi. Über die magnetischen Momente der Atomkerne. Z. Phys., 60, 1930.
- [22] Michael Bortz, Sebastian Eggert, and Joachim Stolze. Spectrum and screening cloud in the central spin model. *Phys. Rev. B*, 81:035315, Jan 2010.
- [23] A. Abragam. Principles of Nuclear Magnetism. Oxford University Press, 1994. S. 174 ff.
- [24] G. S. Uhrig. Skript zur VL: Thermodynamik und Statisktik. 2010. S. 35.
- [25] Eitan Eidelstein, Avraham Schiller, Fabian Güttge, and Frithjof B. Anders. Coherent control of correlated nanodevices: A hybrid time-dependent numerical renormalization-group approach to periodic switching. *Phys. Rev. B*, 85:075118, Feb 2012.
- [26] M. Abramowitz, I. A. Stegun. Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover, 1972. S. 771-802.
- [27] Shan-Jie Zhang, Jianming Jin. Computation of Special Functions. John Wiley and Sons Inc., 1996.
- [28] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, H. Fehske. The kernel polynomial method. *Rev. Mod. Phys.*, 78:279–280, Mar 2006.
- [29] D. Jackson. Trans. Am. Math. Soc. 13, page 491, 1912.
- [30] William H. Press. Numerical Recipes in C++. Cambridge University Press, 2005.
- [31] I. A. Merkulov, G. Alvarez, D. R. Yakovlev, and T. C. Schulthess. Long-term dynamics of the electron-nuclear spin system of a semiconductor quantum dot. *Phys. Rev. B*, 81:115107, Mar 2010.
- [32] Sigurdur I. Erlingsson and Yuli V. Nazarov. Hyperfine-mediated transitions between a zeeman split doublet in gaas quantum dots: The role of the internal field. *Phys. Rev. B*, 66:155327, Oct 2002.
- [33] Sigurdur I. Erlingsson and Yuli V. Nazarov. Evolution of localized electron spin in a nuclear spin environment. *Phys. Rev. B*, 70:205327, Nov 2004.
- [34] Y. Li et al. Intrinsic spin fluctuations reveal the dynamical response function of holes coupled to nuclear spin baths in (in,ga)as quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 108:186603, May 2012.

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei Frithjof Anders bedanken, der meine Arbeit beaufsichtigt hat, immer für Rückfragen zur Verfügung stand und mir viele hilfreiche Anregungen gegeben hat.

Zudem bedanke ich mich bei Joachim Stolze, dass er sich bereit erklärt hat als Zweitgutachter meiner Arbeit zu fungieren.

Ganz besonders möchte ich mich bei meiner Freundin Ann-Kristin Graf bedanken, die mir während des gesamten Studiums großen Rückhalt gegeben hat und auch in sehr stressigen Phasen immer Verständnis und Geduld mit mir hatte.

Ich bedanke mich bei meinen Eltern für ihre menschliche und finanzielle Unterstützung, sowohl während meines Studiums als auch davor.

Darüber hinaus möchte ich mich bei meinen Freunden Thomas Czerniuk, Thorben Jostmeier und Jan Lohrenz bedanken, mit denen ich eine gute Studienzeit in Dortmund hatte und gemeinsam alle Herausforderungen des Studiums gemeistert habe.

Zuletzt möchte ich mich bei meinen Lehrstuhlkollegen Fabian Güttge, Andre Jovchev, Christian Kleine und Benedikt Lechtenberg bedanken, da durch sie stets ein sehr positives Arbeitsklima gewährleistet war und sie sich bei Problemen jeder Art stets hilfsbereit gezeigt haben.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit von mir alleine und ohne fremde Hilfe angefertigt wurde. Ich versichere, dass alle verwendeten Quellen und Hilfsmittel angegeben und evtl. übernommene Textstellen kenntlich gemacht sind. Zudem hat diese Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Johannes Hackmann