Effiziente Algorithmen zur Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im klassischen Zentralspinmodell mit unendlich vielen Badspins

> Masterarbeit zur Erlangung des akademischen Grades Master of Science

> > vorgelegt von Jan Hüdepohl

> > geboren in Lünen

Lehrstuhl für Theoretische Physik I Fakultät Physik Technische Universität Dortmund 2016

- 1. Gutachter : Prof. Dr. Götz S. Uhrig
- 2. Gutachter : Prof. Dr. Frithjof B. Anders

Datum des Einreichens der Arbeit: 30. September 2016

Kurzfassung

Das zentrale Thema dieser Arbeit ist die Ausarbeitung und Anwendung verschiedener Algorithmen zur effizienten Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im klassischen Zentralspinmodell. Dieses Modell beschreibt die Dynamik eines Zentralspins, welcher mit sehr vielen Badspins in Wechselwirkung steht. Anwendung findet dieses Modell im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung, wo der Spin eines Elektrons, der in einem Quantenpunkt über die Hyperfeinwechselwirkung an die benachbarten Kernspins koppelt, als Qubit fungiert. Mit der herkömmlichen Methode zur Lösung aller systemrelevanten Bewegungsgleichungen ist es nicht möglich physikalisch relevante Badgrößen zu simulieren, da die dafür notwendige Rechenzeit für praktische Zwecke zu lang ist.

Die Algorithmen zur näherungsweisen Berechnung der Zentralspindynamik werden hergeleitet und deren Resultate anschließend mit der Lösung aller Bewegungsgleichungen verglichen. Es zeigt sich, dass die Näherungsmethoden die exakte Lösung bei deutlich geringerer Laufzeit beliebig gut approximieren können. Aufbauend auf den nun zur Verfügung stehenden Methoden wird das Langzeitverhalten des Zentralspins bezüglich des Zerfalls seiner Autokorrelation untersucht. Außerdem werden die Effekte von Pulssequenzen auf den Zentralspin mithilfe der neuen Methoden analysiert.

Abstract

The central point of this thesis is the development and application of different algorithms for the efficient calculation of autocorrelation functions in the classical central spin model. This model describes the dynamic of a central spin interacting with a huge number of bath spins. Application for the model lies in the field of quantum computing, where the spin of an electron which couples to the nearby nuclear spins via hyperfine interaction, acts as a qubit. The conventional methods are not able to simulate physically relevant bath sizes because the required computation time is too long for practical use.

After deducing the algorithms, their results will be compared to the full solution of all relevant differential equations. It turns out that the new methods are able to approximate the exact solution while requiring much less computation time. Based on the new available methods the long-run behavior of the central spin referring to the decay of his autocorrelation will be examined. In addition the effects of pulse sequences applied to the central spin will be analyzed using the new methods.

Inhaltsverzeichnis

In	haltsverzeichnis	IV
1	Einleitung	1
2	Physikalische Grundlagen 2.1 Modell	5 5 7
3	Approximative Methoden	11
	3.1 Eingefrorenes Overhauserfeld 3.1.1 Simulation 3.1.2 Analytische Lösung	. 11 . 11 . 12
	3.2 Hierarchie-Methode 3.2.1 Herleitung einer Hierarchie von Overhauserfeldern 3.2.2 Ergebnisse	14 14 14
	3.3 Lanczos-Methode 3.3.1 Verwendung orthogonaler Polynome 3.3.2 Ergebnisse 2.2.3 Line or more dlich wielen De dening	17 17 21
	3.3.3 Lines unendich vieler Badspins 3.4 Spektraldichte-Methode 3.4.1 Untersuchung der Lanczos-Koeffizienten 3.4.2 Kettenbruchdarstellung der Spektraldichte	25 26 26 28
	3.4.3 Herleitung einer kontinulerlichen Spektraldichte	. 31 . 34 . 36 . 37
4	Langzeitverhalten des Zentralspins4.1Zeitliche Skalierung4.2Logarithmischer Abfall	41 41 44
5	Pulse 5.1 Methodik und Pulsarten 5.2 Entstehen eines Kommensurabilitätssignals 5.3 Entwicklung der Verteilung des Overhauserfeldes	49 49 51 57
6	Zusammenfassung und Ausblick	65
Qı	uellenverzeichnis	67

1 Einleitung

Das im Jahre 1965 von Gordon E. Moore formulierte *Mooresche Gesetz* [1] besagt, dass sich die Anzahl der Schaltkreiskomponenten beziehungsweise Transistoren auf einer Halbleiterplatine alle 12-24 Monate verdoppelt (Abbildung 1.1).



Abbildung 1.1: Logarithmische Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Anzahl an Komponenten auf einem integrierten Schaltkreis aus dem ursprünglichen Artikel von Gordon Moore aus dem Jahre 1965 [1].

Bis zum heutigen Tag hat sich dieses Gesetz in verschiedensten Formulierungen auffallend gut bestätigt. Elektronische Bauteile scheinen einem immer währenden Schrumpfungsprozess unterworfen, welcher den Bau immer leistungsfähigerer Computer ermöglicht. Diesem Schrumpfungsprozess sind allerdings klare physikalische Grenzen gesetzt. Stoßen die einzelnen Bauteile größentechnisch in einen Bereich von ungefähr 5 nm vor, so werden sich neben dem Problem der entstehenden und abzuführenden thermischen Energie die auftretenden Quanteneffekte nicht länger vernachlässigen lassen. Auf dem herkömmlichen Wege der Verkleinerung wird es von dem Zeitpunkt an nicht länger möglich sein, Computern bei gleichbleibender Größe zu mehr Rechenleistung zu verhelfen. Einige komplexe und rechenaufwändige Probleme, wie zum Beispiel die Primfaktorzerlegung sehr großer Zahlen, werden sich daher, aufgrund von exponentiell wachsendem Rechenaufwand, nur bis zu einem gewissen Maße von konventionellen Computern lösen lassen. Es bedarf daher alternativer Technologien.

Quantencomputer [2] sind ein vielversprechender Kandidat für eine solche Technologie. Statt mit klassischen Bits arbeiten diese mit sogenannten Qubits. Qubits können neben den beiden klassischen Zuständen 0 und 1 eines Bits zusätzlich quantenmechanische Superpositionen beider Zustände annehmen, was die Nutzung völlig neuer Algorithmen wie zum Beispiel des Shor-Algorithmus [3] zur Primfaktorzerlegung oder des Suchalgorithmus von Grover [4] ermöglicht.

Zur physikalischen Realisierung eines Qubits braucht es ein quantenmechanisches Zwei-Niveau-

System. Eine Möglichkeit hierfür bietet ein in einem Quantenpunkt in den drei Raumrichtungen eingeschlossenes und lokalisiertes Elektron [5], dessen Spin ein solches Zwei-Niveau-System darstellt. Verwendet werden üblicherweise Halbleiterquantenpunkte aus Materialien wie zum Beispiel GaAs [6, 7]. Ein fundamentales Kriterium für den Bau eines Quantencomputers ist die Möglichkeit der Speicherung von Information. Lange Dekohärenzzeiten der Elektronenspins sind die Voraussetzung, damit Information in halbleiterquantenpunktbasierten Qubits über einen längeren Zeitraum erhalten bleibt. Ursächlich für den Verlust der Information durch Dekohärenzeffekte ist die Wechselwirkung des Elektrons mit seiner Umgebung. Zur Dephasierung des Elektronenspins beitragende Mechanismen wie die Spin-Bahn-Kopplung sind für in einem Quantenpunkt lokalisierte Elektronen stark unterdrückt [8, 9]. Dominiert wird die Relaxation des Elektrons daher von der Hyperfein-Wechselwirkung mit den umgebenden Kernspins. Die Dipolwechselwirkung sowie quadrupolare Effekte zwischen den Kernspins können vernachlässigt werden, da sie sich erst auf deutlich größeren Zeitskalen auf die Physik auswirken, als die Hyperfein-Wechselwirkung [10]. Die Zahl N an Kernspins, welche aufgrund ihrer Kopplungsstärke einen physikalisch relevanten Beitrag zur Dephasierung des Elektrons liefern, beläuft sich im GaAs basierten Halbleiterguantenpunkt auf $N \approx 10^5$.

Das in dieser Arbeit untersuchte Zentralspinmodell eignet sich insbesondere zur Beschreibung der Hyperfein-Wechselwirkung von Elektronenspin (Zentralspin) und Kernspins (Badspins) in Quantenpunkten. Die Lösung der quantenmechanischen Version des Modells ist insbesondere für große Badgrößen häufig mit einem außerordentlich hohen numerischen Aufwand verbunden und daher soll in dieser Arbeit sein klassisches Pendant betrachtet werden. Bisherige Forschungen im Bereich des klassischen und semiklassischen Zentralspinmodells [11, 12, 13] waren häufig dem Problem begrenzter rechentechnischer Ressourcen unterworfen. Aufgrund der durchzuführenden Ensemblemittelung, welche eine hohe Anzahl an Durchläufen einer einzelnen Simulation verlangt, bleibt zumeist nur die Möglichkeit auf einfacher zu berechnende kleine Badgrößen im Bereich N = 10-1000 auszuweichen. Die computergestützte Erforschung physikalisch relevanter Badgrößen, wie sie im Experiment vorliegen, ist mit den herkömmlichen klassischen Methoden aufgrund eingeschränkter Rechenzeit im Prinzip nicht möglich. Es bedarf neuer Konzepte, um das Dekohärenzverhalten von Elektronen in Quantenpunkten durch das Zentralspinmodell beschreiben und untersuchen zu können. Der zentrale Punkt dieser Arbeit ist daher die Herleitung und Präsentation verschiedener Algorithmen, welche die effiziente Berechnung der Zentralspindynamik im klassischen Zentralspinmodell ermöglichen. Der Inhalt dieser Arbeit strukturiert sich wie folgt: In Kapitel 2 werden zunächst das behandelte klassische Zentralspinmodell, sowie die modellrelevanten klassischen Bewegungsgleichungen vorgestellt. Anschließend werden in Kapitel 3 die erarbeiteten approximativen Methoden und deren Algorithmen zur effizienten Berechnung der Zentralspintrajektorie präsentiert. Zunächst wird gezeigt, wie sich die Dynamik des sich aus den Badspins zusammensetzenden Overhauserfeldes in einer einfach zur trunkierenden Hierarchie von Bewegungsgleichungen erfassen lässt. Diese Methode wird anschließend dahingehend verbessert, dass orthonormale Polynome zur Darstellung der Overhauserfeldhierarchie verwendet werden können, was die Genauigkeit der Methode enorm steigert. Die letzte Methode, welche im Zuge dieser Arbeit präsentiert wird, basiert auf einer analytischen Berechnung der Spektraldichte des Systems, was eine flexible Diskretisierung ermöglicht.

Darauf aufbauend wird mit den nun zur Verfügung stehenden Konzepten in Kapitel 4 das Langzeitverhalten des Zentralspins in Bezug auf die sich als Zerfall der Autokorrelation im Langzeitlimes äußernde Dephasierung untersucht. Abschließend wird in Kapitel 5 analysiert, inwieweit sich angelegte longitudinale Magnetfelder und das Pulsen des Zentralpins, sowie dadurch verursachte auftretende Phänomene durch die gezeigten Methoden erfassen lassen. In Kapitel 6 werden die gesammelten Resultate zusammengefasst und ein kurzer Ausblick auf mögliche zukünftige Forschungen gegeben.

2 Physikalische Grundlagen

2.1 Modell

Das Zentralspinmodell oder auch Gaudin-Modell [14, 15] eignet sich gut zur Beschreibung der Hyperfeinwechselwirkung zwischen Elektronenspin \hat{S}_0 und den ihn im Quantenpunkt umgebenden Kernspins \hat{S}_i (Abbildung 2.1).



Abbildung 2.1: Skizzierte Darstellung des Zentralspinmodells ((2.1)). Der Zentralspin S_0 steht über die Kopplungskonstanten J_i in Wechselwirkung mit den Badspins S_i .

Die Größe J_i beschreibt hierbei die Stärke der Kopplung zwischen Badspin S_i und dem Zentralspin. Quantenmechanisch wird das Modell beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -h\hat{S}_0^z + \hat{\boldsymbol{S}}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{B}} \quad , \tag{2.1}$$

mit einem externen Magnetfeld der Stärke h und dem sich aus den Badspins und den Kopplungen zusammensetzenden Overhauserfeld

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \sum_{i=1}^{N} J_i \hat{\boldsymbol{S}}_i \ . \tag{2.2}$$

Da die typische Zeitskala der auftretenden Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen den Kernspins ein bis zwei Größenordnungen über der Zeitskala der Hyperfein-Wechselwirkung liegt [6, 16], werden die Badspins im Modell als untereinander nicht wechselwirkend betrachtet. Eine exakte Lösung des Modells für Badgrößen bis N = 48 im Bereich sehr schwacher bis starker Magnetfelder basierend auf dem algebraischen Bethe Ansatz in Kombination mit

Monte-Carlo Sampling präsentieren Faribault et al. in [17]. Hier ist man aufgrund des exponentiell wachsenden Aufwands weit von realistischen Badgrößen entfernt. Aufgrund der Dominanz $k_{\rm B}T \gg E_{\rm Qp}$ der thermischen Energie im Experiment gegenüber der typischen intrinsischen Energieskala $E_{\rm Qp}$ im Quantenpunkt ist die Annahme vollständig unpolarisierter Badspins zum Zeitpunkt t = 0 gerechtfertigt. Die Experimente werden zumeist bei Temperaturen im Bereich T = 6-50 K durchgeführt. Die Energieskala thermischer Fluktuationen liegt dementsprechend im Bereich $k_{\rm B}T \approx 10^{-4} \cdot 10^{-3} \,\text{eV}$ und damit mindestens eine Größenordnung über $E_{\rm Qp}$.

Die Kopplungen J_i im System sind inhomogen. Der Grund hierfür liegt in der räumlich inhomogenen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(\mathbf{r})|^2$ des Elektrons im Quantenpunkt. Sie sorgt dafür, dass die im System zufällig angeordneten Kernspins unterschiedlich starke Wahrscheinlichkeitsamplituden des Elektrons spüren, was sich im Modell in einer Variation der Stärke der Kopplungen ausdrückt. In der zugrundeliegende Hyperfeinwechselwirkung existiert eine Proportionalität zwischen J_i und der Wahrscheinlichkeit $|\psi(\mathbf{r})|^2$. Explizit gilt für die Wellenfunktion eines Elektrons im Quantenpunkt [11]

$$|\psi(\boldsymbol{r}_k)|^2 \propto e^{-\left(\frac{\boldsymbol{r}_k}{R}\right)^a},\tag{2.3}$$

wobei für a = 1 ein exponentieller und für a = 2 ein gaußförmiger Verlauf angenommen wird. Das Volumen, in welchem sich die aufgrund ihrer Kopplungsstärke an den Zentralspin für das physikalische Verhalten relevanten $N \approx 10^5$ Badspins befinden, wird durch den Radius R beschrieben. Die Annahme einer exponentiellen Skalierung der Kopplungen gemäß

$$J_i = \sqrt{\frac{1 - e^{-2\gamma}}{1 - e^{-2\gamma N}}} e^{-\gamma(i-1)} , \quad i \in [1,N] , \qquad (2.4)$$

soll in dieser Arbeit Verwendung finden. Der Parameter γ ist hier proportional zur Anzahl der Badspins und legt gleichzeitig die Geschwindigkeit des Abfalls der Kopplungen fest. Zusätzlich soll basierend auf bisherigen Forschungen [16] eine linear abfallende Kopplungsverteilung mit

$$J_i = \sqrt{\frac{6N}{2N^2 + 3N + 1}} \frac{N + 1 - i}{N} J_q , \quad i \in [1, N] , \qquad (2.5)$$

untersucht werden. Beide Verteilungen sind so normiert, dass

$$J_q^2 \coloneqq \sum_i^N J_i^2 = 1.$$
(2.6)

Die Wurzel J_q aus dem zweiten Moment der Kopplungen definiert unter der Wahl natürlicher Einheiten ($\hbar = 1$) eine Energieskala [10] und legt gleichzeitig die Zeitskala für die Kurzzeitdynamik des Zentralspins fest. Infolgedessen wird in den folgenden Simulationen die Zeit t stets in Einheiten von $1/J_q$ angegeben. Im Experiment liegt diese Zeiteinheit in der Größenordnung einer Nanosekunde [7].

Abbildung 2.2 veranschaulicht den Verlauf der Kopplungsverteilungen durch Darstellung der exponentiellen Kopplungen für N = 1000 Badspins und drei verschiedene Parameter γ . Zum Vergleich sind zusätzlich die äquidistanten Kopplungen aufgetragen. Offensichtlich sind in den exponentiellen Kopplungsverteilungen für kleine γ viele Kopplungen der selben Größenordnung vertreten. Die Verteilung verläuft insgesamt flacher, sodass auch die schwächeren Kopplungen einen wichtigen Beitrag zur Zentralspindynamik liefern, während die Kopplungsverteilung für große γ rasch abfällt und das System in diesem Fall von einigen wenigen großen Kopplungen dominiert wird. Es wird sich im Verlauf der Arbeit zeigen, dass die schwächeren Kopplungen im System das Langzeitverhalten des Zentralspins bestimmen. In Experimenten werden Messungen zumeist nicht an einzelnen, sondern an größeren Ensembles von Quantenpunkten durchgeführt. Um die zugrundeliegende Quantenmechanik



Abbildung 2.2: Verlauf der Kopplungsverteilungen (2.4) und (2.5) für N = 1000 Badspins und verschiedene Parameter γ .

möglichst genau durch eine klassische Rechnung beschreiben zu können, werden die quantenmechanischen Erwartungswerte ersetzt durch Mittelwerte der klassischen Größen. In der Modellbetrachtung werden daher stets verschiedenene Simulationsdurchläufe mit zufällig verteilten Startwerten durchgeführt, über die anschließend gemittelt wird. Diese Mittelwerte sollten die tatsächlichen quantenmechanischen Größen in guter Näherung beschreiben. In dieser Arbeit steht zumeist die gemittelte Autokorrelationsfunktion $\langle S_0^z(t)S_0^z(0)\rangle$ der z-Komponente des Zentralspins im Zentrum der Betrachtung. Autokorrelationsfunktionen beschreiben grundsätzlich den Zusammenhang einer Größe mit sich selbst zu einem früheren Zeitpunkt (hier zum Zeitpunkt t = 0). Die Startwerte für S_0 werden komponentenweise einer Gaußverteilung mit Mittelwert $\mu = 0$ entnommen, wobei die Varianz σ^2 in Analogie zur Quantenmechanik durch den Erwartungswert für Spin S = 1/2 gegeben ist, sodass

$$\langle S_0^z(0)S_0^z(0)\rangle = \sigma^2 = \frac{1}{4}$$
(2.7)

zu Beginn der Simulation gilt.

2.2 Klassische Bewegungsgleichungen

In der klassischen Betrachtung des Problems werden die Spins nicht wie in der quantenmechanischen Beschreibung durch Operatoren dargestellt. Ihre Analogien in der klassischen Physik sind einfache Drehimpulse, dargestellt durch Vektoren im \mathbb{R}^3 . Es folgt nun eine Herleitung der gesuchten Bewegungsgleichungen aus der Quantenmechanik. Das Aufstellen der Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für den Zentralspin im betrachteten System führt mit der Kommutatorrelation für Drehimpulse $[S^{\alpha}, S^{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S^{\gamma}$ mit $\{\alpha, \beta, \gamma\} \in \{x, y, z\}$ auf die operatorwertige Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{S}}_{0} = i\left[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{S}}_{0}\right]$$
(2.8a)

$$= i \left[\hat{\boldsymbol{S}}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{B}}, \hat{\boldsymbol{S}}_0 \right]$$
(2.8b)

$$= i \left[\hat{S}_0^x \hat{B}^x, \hat{\boldsymbol{S}}_0 \right] + i \left[\hat{S}_0^y \hat{B}^y, \hat{\boldsymbol{S}}_0 \right] + i \left[\hat{S}_0^z \hat{B}^z, \hat{\boldsymbol{S}}_0 \right]$$
(2.8c)

$$= \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{S}_0 \;. \tag{2.8d}$$

Für die hier betrachteten klassischen Drehimpulse gilt daher analog

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{S}_0 \;, \tag{2.9a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_{i} = J_{i}\boldsymbol{S}_{0} \times \boldsymbol{S}_{i} \quad i \in [1,N] , \qquad (2.9b)$$

wobei $\boldsymbol{B} = \sum_{i}^{N} J_i \boldsymbol{S}_i$ das klassische Overhauserfeld definiert. Gleichung (2.9a) beschreibt die Präzession des Zentralspins um das klassische Overhauserfeld und die N Gleichungen in (2.9b) spezifizieren die Präzession der einzelnen Badspins um das vom Zentralspin induzierte Feld. Die Herleitung von Gleichung (2.9b) aus der Quantenmechanik verläuft analog. Der Nachteil dieser klassischen Betrachtung ist, dass die Länge der einzelnen Spins nicht quantenmechanisch korrekt behandelt wird. Hierauf wird im Laufe der Arbeit noch näher eingegangen. Für die Gesamtenergie im System und deren zeitliche Ableitung gilt

$$E = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S}_0 \tag{2.10a}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \dot{\boldsymbol{B}} \cdot \boldsymbol{S}_0 + \boldsymbol{B} \cdot \dot{\boldsymbol{S}}_0 = 0 , \qquad (2.10\mathrm{b})$$

was sich durch Einsetzen der Gleichungen (2.9a) und (2.9b) in Gleichung (2.10a) zeigen lässt. Die Gesamtenergie ist also erhalten. Der hier betrachtete klassische Ansatz legitimiert sich dadurch, dass die Präzessionsbewegungen von Zentralspin und den Badspins auf verschiedenen Zeitskalen stattfinden. Die dominante Stärke des Overhauserfeldes \boldsymbol{B} verglichen mit dem effektiven vom Zentralspin induzierten Feld \boldsymbol{S}_0 sorgt für eine um den Faktor \sqrt{N} schnellere Präzession des Zentralspins verglichen mit den einzelnen Badspins. Der einzelne Badspin spürt also lediglich ein Langzeitmittel der Zentralspintrajektorie, was eine klassische Beschreibung von \boldsymbol{S}_0 rechtfertigt. Um die Dynamik von \boldsymbol{S}_0 im klassischen Modell zu bestimmen, besteht die Möglichkeit die N + 1 Gleichungen (2.9a) und (2.9b) in jedem Zeitschritt t zu lösen. Hierzu eignen sich numerische Standardverfahren, wie zum Beispiel die Runge-Kutta-Integration. Diese wird, zum Teil unter Verwendung einer adaptiven Schrittweite, zur Lösung sämtlicher in der Arbeit gelöster Differenzialgleichungen angewendet.

Abbildung 2.3 zeigt die Autokorrelationsfunktion des Zentralspins als Lösung der Gleichungen (2.9a) und (2.9b) für den Fall exponentiell gekoppelter Badspins mit $\gamma = 0.03$ und N = 100. Dargestellt sind die Kurven für Mittelungen der Werte über verschieden viele Durchläufe der Simulation. Außerdem sind die jeweiligen sich aus der Varianz σ^2 der betrachteten Größen ergebenden statistischen Fehler als Standardabweichung der Rechnung, resultierend aus dem Welford-Algorithmus [18], mit aufgeführt. Anhand der Abbildung wird deutlich, dass die gezeigten Fehler proportional zu den statistischen Schwankungen der einzelnen Kurven sind und infolgedessen mit steigender Anzahl an Simulationsdurchläufen M mit $1/\sqrt{M}$ abnehmen. Aus diesem Grund wird in den folgenden Abbildungen der gesamten Arbeit auf die Angabe von Fehlern in den Plots verzichtet.



Abbildung 2.3: Autokorrelation des Zentralspin resultierend aus den Gleichungen (2.9a) und (2.9b) für Mittelungen über verschieden viele Durchläufe der Simulation mit Standardabweichung.

Ferner wird in einem Großteil der späteren Rechnungen stets über eine Gesamtzahl von exakt $M = 10^6$ einzelnen Durchläufen gemittelt.

Der Inhalt des nächsten Kapitels setzt sich zusammen aus der Herleitung und Präsentation verschiedener approximativer Methoden, welche dem Zweck dienen sollen, die Dynamik im klassischen Zentralspinmodell effizienter berechnen zu können.

3 Approximative Methoden

3.1 Eingefrorenes Overhauserfeld

Ein erster Ansatz zur Approximation der vollen Simulation besteht in der Annahme eines durch die Badspins erzeugten in der Zeit konstanten Feldes $\mathbf{B}(t) = \text{const.}$, welches in Wechselwirkung mit dem Zentralspin steht. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einem eingefrorenen Overhauserfeld. Legitimation erhält dieser Ansatz durch die unterschiedlichen Zeitskalen, auf welcher die Präzessionsbewegungen von Zentralspin und Badspins stattfinden. Aufgrund der Dominanz des durch die Badspins erzeugten Feldes \mathbf{B} gegenüber dem Zentralspin \mathbf{S}_0 , um den die einzelnen Badspins präzedieren, ist die Dynamik des Zentralspins deutlich schneller. Aus seiner Sicht scheint also die Annahme ruhender Badspins und einem damit einhergehenden zeitlich konstanten Overhauserfeld in erster Näherung gerechtfertigt. Im Folgenden soll der dargestellte Fall der Präzession des Zentralspins um ein eingefrorenes Overhauserfeld zunächst durch eine Simulation erfasst und anschließend durch eine analytische Lösung nach Merkulov et al. [10] beschrieben werden.

3.1.1 Simulation

Die zeitliche Entwicklung des Zentralspins bei Präzession um ein konstantes Feld ergibt sich aus Gleichung (2.9a), wobei die Komponenten des Overhauserfeldes \boldsymbol{B} zu Beginn aus einer Normalverteilung mit Varianz $\sigma^2 = 1/4$ gezogen werden. Abbildung 3.1 zeigt den Verlauf der Korrelationsfunktion für eine Rechnung über 10⁵ Ensembles. Nach dem Abfall auf ihr charakteristisches erstes Minimum strebt die Korrelationsfunktion gegen den konstanten Wert

$$\langle S_0^z(t) S_0^z(0) \rangle = 1/3 \langle S_0^z(0) S_0^z(0) \rangle = 1/12 = 0.08\overline{3}.$$
(3.1)

Die Dephasierung des Zentralspins, verursacht durch die in dieser Näherung nicht berücksichtigte Präzession der einzelnen Badspins, welche sich durch den Abfall Korrelationsfunktion für $t > 10 J_q^{-1}$ ausdrückt, wird von der Approximation eines eingefrorenen Overhauserfeldes offensichtlich nicht erfasst.

Im nächsten Abschnitt wird eine analytische Lösung für das soeben dargelegte Szenario der Spinpräzession um ein konstantes Feld vorgestellt.



Abbildung 3.1: Simulation der Präzession eines Spins um ein konstantes gaußförmiges Feld \boldsymbol{B} und volle Lösung aller Bewegungsgleichungen für eine Präzession um N = 1000 Badspins mit exponentieller Kopplung mit Kopplungsparameter $\gamma = 0.01$.

3.1.2 Analytische Lösung

Allgemein gilt für die Dynamik eines Spins S in einem festen Magnetfeld B:

$$S(t) = (S_0 \cdot \boldsymbol{n}) \, \boldsymbol{n} + [S_0 - (S_0 \cdot \boldsymbol{n}) \, \boldsymbol{n}] \cos \omega t + \{ [S_0 - (S_0 \cdot \boldsymbol{n}) \, \boldsymbol{n}] \times \boldsymbol{n} \} \sin \omega t , \qquad (3.2)$$

wobei \boldsymbol{S}_0 die Anfangskonfiguration des Spins,

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{B}}{|\boldsymbol{B}|} \tag{3.3}$$

den Normalenvektor in Magnetfeldrichtung und

$$\omega = \frac{\mu_B g_e}{\hbar} |\boldsymbol{B}| \tag{3.4}$$

die Larmor-Frequenz der Spinpräzession im Magnetfeld beschreiben. Mittelt man diese Gleichung über verschiedene gaußförmig verteilte Magnetfeldkonfigurationen, so ergibt sich die zeitabhängige Spinpolarisation zu

$$\langle \boldsymbol{S}(t) \rangle = \frac{\boldsymbol{S}_0}{3} \left\{ 1 + 2 \left[1 - 2 \left(\frac{t}{T_\Delta} \right)^2 \right] \exp \left[- \left(\frac{t}{T_\Delta} \right)^2 \right] \right\} , \qquad (3.5)$$

mit der die Zeitskala der anfänglichen Relaxation bestimmenden Zeitkonstanten T_{Δ} . Nach Definition der Energiekonstanten J_q über die Summe der quadratischen Kopplungen ist im Falle $\hbar = 1$ die Zeitkonstante festgelegt durch

$$T_{\Delta} = \frac{1}{J_q},\tag{3.6}$$

wobei sie damit wegen

$$\langle B_i^2 \rangle = \sigma^2 + \mu^2 \tag{3.7}$$

für $\mu = 0$ umgekehrt proportional zur Standardabweichung der Magnetfeldverteilung ist. In Abbildung 3.2 ist der Verlauf der Merkulovschen Lösung für einen Startwert $S_0^z(0) = 1/2$ neben der Simulation aus dem vorherigen Abschnitt und der Lösung aller Bewegungsgleichungen für eine Präzession um N = 1000 Badspins dargestellt.



Abbildung 3.2: Analytische Lösung der Präzession eines Spins um ein konstantes Magnetfeld B und volle Lösung aller Bewegungsgleichungen für eine Präzession um N = 1000 Badspins mit exponentieller Kopplung mit Kopplungsparameter $\gamma = 0.01$.

Wie zu erwarten, stimmen die analytische Lösung und die Simulation der Spinpräzession um ein festes Magnetfeld bis auf statistische Schwankungen exakt überein. Dadurch, dass in dieser Methode die Spindephasierung nach dem ersten Minimum nicht mehr erfasst wird, eignet sie sich nicht zur Simulation der Langzeitdynamik des Zentralspins. Im Folgenden Kapitel wird eine Methode vorgestellt, welche es ermöglicht die Fluktuationen des Bades in der Simulation zu berücksichtigen, wodurch eben diese Dephasierung erfasst werden kann.

3.2 Hierarchie-Methode

3.2.1 Herleitung einer Hierarchie von Overhauserfeldern

Die vorangehenden Betrachtungen basierten auf der Annahme eines konstanten Overhauserfeldes und schlossen damit eine Präzession der einzelnen Badspins aus. Dies stellt eine gute erste Näherung dar, kann jedoch offensichtlich nicht die ganze Physik erfassen. Eine Möglichkeit wäre es zusätzlich die zeitliche Entwicklung jedes Badspins durch Lösen der entsprechenden Differenzialgleichung verfolgen, was jedoch aus den in Abschnitt 2.2 genannten Gründen ineffizient ist. Eine andere Möglichkeit ist es, anstatt jeden Badspin einzeln zu betrachten, die Dynamik des Overhauserfeldes B als Ganzes zu studieren [19]. Die explizite Berechnung der zeitlichen Entwicklung von B führt auf

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{B} = J_i \boldsymbol{S_0} \times \sum_i J_i \boldsymbol{S_i}$$
(3.8a)

$$= S_0 \times \sum_i J_i^2 S_i \tag{3.8b}$$

$$\coloneqq \mathbf{S}_{\mathbf{0}} \times \mathbf{B}_2 \ . \tag{3.8c}$$

Das Aufgeben der Annahme eines konstanten Overhauserfeldes führt offenbar in erster Ordnung zu einer einfachen Präzessionsbewegung von B um ein neues Feld B_2 . Nach dem selben Schema lässt sich nun die Dynamik von B_2 berechnen, was schließlich die Definition

$$\boldsymbol{B}_n \coloneqq \sum_{i=1}^N J_i^n \boldsymbol{S}_i \tag{3.9}$$

nahelegt. Man erhält damit für das Wechselspiel der Dynamiken von Zentralspin und Overhauserfeld eine Hierarchie von Differenzialgleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{B}_n = \boldsymbol{S}_0 \times \boldsymbol{B}_{n+1} , \qquad (3.10)$$

welche bis zu beliebigem $n = n_{\text{max}}$ iteriert werden kann. Die Felder $\boldsymbol{B}(t)$ werden zu Beginn jeweils gaußverteilt mit einer Varianz $\sigma^2 = 1/4$ gewählt, wodurch sich die Eigenschaften der Gaußverteilung, wie, dass Summen von gaußverteilten Zufallsgrößen ebenfalls gaußverteilt sind, auf das Overhauserfeld übertragen. Die Komponenten der Felder gehorchen den Korrelationen

$$\langle B_n^{\alpha} B_m^{\beta} \rangle = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^N J_i^{n+m} \tag{3.11a}$$

$$=\frac{C_{n+m}}{4}\delta_{\alpha\beta} \tag{3.11b}$$

und für den speziellen Fall der exponentiellen Kopplungen gilt insbesondere

$$C_d \coloneqq \sum_i J_i^d = J_0 \sum_i e^{-d(i-1)\gamma} = (2\gamma)^{\frac{d}{2}} \frac{1}{d\gamma}$$
(3.12a)

$$=\frac{2^{\frac{a}{2}}}{d}\cdot\gamma^{\frac{d}{2}-1}\tag{3.12b}$$

mit d = n + m. Die sich daraus ergebende Korrelationsmatrix

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{2^{\frac{2}{3}}}{3}\sqrt{\gamma} & \gamma & \cdots \\ \frac{2^{\frac{3}{2}}}{3}\sqrt{\gamma} & \gamma & \frac{2^{\frac{5}{2}}}{5}\gamma^{\frac{3}{2}} & \cdots \\ \gamma & \frac{2^{\frac{5}{2}}}{5}\gamma^{\frac{3}{2}} & \frac{8}{6}\gamma^{2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
(3.13)

ist reell und symmetrisch und lässt sich daher mit einer orthogonalen Transformation

$$\underline{\underline{O}}^T \underline{\underline{C}} \underline{\underline{O}} = \underline{\underline{D}}$$
(3.14)

diagonalisieren. Die Startwerte der B'_n können aus einer Normalverteilung mit diagonaler Korrelationsmatrix und Varianz $\sigma^2 = \lambda_i^2$ entnommen werden, wobei λ_i die Eigenwerte der Korrelationsmatrix sind. Anschließend müssen die gaußförmig verteilten Felder B' nach

$$\boldsymbol{B} = \underline{O}\boldsymbol{B}' \tag{3.15}$$

zurück in die ursprüngliche Basis transformiert werden. Der Vorteil der Hierarchie-Methode ist, dass nun nicht mehr in jedem Zeitschritt das Verhalten aller N + 1 Spins einzeln berechnet werden muss, sondern man lediglich die zeitliche Entwicklung einer Hierarchie von Overhauserfeldern, sowie die des Zentralspins verfolgt. Der dargestellte Basiswechsel führt auf eine Hierarchie von Bewegungsgleichungen (3.10), die sich nun beliebig trunkieren lässt. Anders als in der ursprünglichen Basis, wo eine Trunkierung der Differenzialgleichung lediglich das Weglassen der restlichen Spins und damit die Beschreibung einer anderen Physik bedeutet hätte, wird das Overhauserfeld hier in Potenzen der Kopplungen J_i entwickelt. Für die Kopplungen gilt jedoch allgemein $J_i \ll 1$, was sie als Entwicklungsparameter prädestiniert und damit eine Trunkierung in deren Potenzen legitimiert. Aufgrund der immensen Systemgröße von $N \approx 10^5$ Badspins im Quantenpunkt, lässt diese Hierarchie-Methode eine deutliche Steigerung der Effizienz der Berechnung erwarten.

3.2.2 Ergebnisse

Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf der Korrelationsfunktion $\langle S_0^z(t)S_0^z(0)\rangle$ des Zentralspins unter Verwendung der Hierarchie-Methode bis zu verschiedenen Level
n $n_{\rm max}$ für die exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 Spins. Zum Vergleich wurde außerdem die Merkulovsche Lösung aus Gleichung (3.5) dargestellt. Die ebenfalls gezeigte volle Simulation aller Spins (siehe Kapitel 2.2) ermöglicht eine Aussage über die Genauigkeit der Simulation. Für $n_{\rm max} = 1$ ergibt sich aufgrund der sich ergebenden Präzessionsbewegung um ein konstantes Overhauserfeld erwartungsgemäß die Merkulov-Lösung. Man erkennt außerdem, dass sich die aus der Hierarchie resultierende Korrelationsfunktion für wachsende n_{\max} über einen größeren Zeitraum verhält wie die direkte Lösung aller N + 1 Bewegungsgleichungen, bevor sie ein unphysikalisches Verhalten zeigt. Für $n_{\text{max}} = 10$ ist die Kurve bis zu $t \approx 25 \left[J_q^{-1} \right]$ deckungsgleich mit der vollen Simulation. Das Kurzzeitverhalten des Zentralspins wird somit durch die Hierarchie-Methode gut erfasst. Es besteht jedoch ebenfalls Interesse am Langzeitverhalten, welches auf diesem Wege nicht hinlänglich bestimmt werden kann. Das Erhöhen von n_{\max} führt zwar zu einer Vergrößerung des stabilen Bereichs der Simulation, allerdings ist die Konvergenz des Verfahrens deutlich zu langsam. Ein Anwachsen der zu lösenden Differenzialgleichungen mit n_{max} führt offensichtlich zu steigendem Rechenaufwand, was im Widerspruch



Abbildung 3.3: Korrelationsfunktion des Zentralspins als Resultat der Hierarchie-Methode mit N = 1000 Spins und exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ im Vergleich zur Merkulovschen Lösung, sowie der vollen Simulation.

zur eigentlichen Idee der Hierarchie-Methode stehen würde. Es stellt sich nun die Frage, warum die Ergebnisse dieser Methode derart schnell von der vollen Simulation abweichen. Eine mögliche Begründung liegt in der Nicht-Hermitizität der Abbildungsmatrix im Differenzialgleichungssystem der Methode. Sei <u>B</u> der Supervektor, welcher die einzelnen 3er Vektoren B_n als Komponenten enthält. Dann lässt sich die Hierarchie von Differenzialgleichungen (3.10) schreiben als

$$\frac{d}{dt}\underline{B} = S_0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} \underline{B} ,$$
(3.16)

wobei das Vektorprodukt mit S_0 bezüglich des Supervektors komponentenweise zu verstehen ist. Die hier auftretende Matrix ist nicht-hermitesch, was sich auch unter der orthogonalen Transformation in Gleichung (3.15) nicht ändert und daher kann das Auftreten imaginärer Eigenwerte der Matrix nicht ausgeschlossen werden. Diese imaginären Eigenwerte lassen sich im zugehörigen System von Bewegungsgleichungen exponentiell in der Zeit divergierenden Lösungen zuordnen, was das instabile Verhalten der Methode erklären könnte. Aus diesem Grund wird im nächsten Abschnitt eine Verbesserung der Methode unter Verwendung orthogonaler Polynome präsentiert, wodurch sich das Differenzialgleichungssystem durch eine hermitesche Matrix beschreiben lässt.

3.3 Lanczos-Methode

Nachdem im vorangehenden Kapitel eine Methode zur effizienten Berechnung der Zentralspindynamik vorgeschlagen wurde, welche sich jedoch nicht zur Analyse des Langzeitverhaltens eignet, soll nun ein Verfahren präsentiert werden, dass für eine entscheidende Verbesserung bezüglich der Stabilität der Berechnung für große Zeiten t sorgt. Erreicht wird dies durch Verwendung orthonormaler Polynome in der Hierarchie der Overhauserfelder, die sich mithilfe des Lanczos-Algorithmus [20] berechnen lassen.

Hierbei handelt es sich um einen iterativen Algorithmus, welcher sich unter anderem zur Berechnung von Eigenwerten und Eigenzuständen von Matrizen eignet. In diesem Kapitel wird er zur Berechnung der Tridiagonalmatrix einer linearen hermiteschen Abbildung verwendet. Für alle weiteren Betrachtungen sollen an dieser Stellen die dimensionslosen und auf J_q normierten Kopplungsparameter

$$a_i \coloneqq \frac{J_i}{J_q} \tag{3.17}$$

definiert werden.

3.3.1 Verwendung orthogonaler Polynome

Die im vorherigen Abschnitt eingeführte Definition

$$\boldsymbol{B}_n = \sum_{i=1}^N J_i^n \boldsymbol{S}_i \tag{3.18}$$

des Overhauserfeldes in der *n*-ten Ordnung der Hierarchie entspricht der Verwendung von Polynomen $p_n(a_i)$, welche die bezüglich des Skalarproduktes

$$\langle p_n | p_m \rangle = \sum_{i=1}^{N} p_n^*(a_i) p_m(a_i)$$
 (3.19)

nicht-orthogonale Monombasis $\{a_i, a_i^2, a_i^3, ...\}$ aufspannen. Die Idee ist es nun die Hierarchie von Overhauserfeldern nach

$$\boldsymbol{P}_n = \sum_{i=1}^N p_n(a_i) \boldsymbol{S}_i \tag{3.20}$$

durch orthonormale Polynome der Kopplungen $p_n(a_i)$ zu beschreiben. Das hat unter anderem den Vorteil, dass die Korrelationsmatrix der aus den orthonormalen Polynomen generierten Felder per Definition Diagonalgestalt hat. Dies wird deutlich unter Betrachtung des Skalarproduktes zweier verschiedener Felder:

$$\langle P_n^j P_m^j \rangle = \sum_i p_n(a_i) p_m(a_i) \langle (S_i^j)^2 \rangle$$
(3.21a)

$$= \frac{1}{4} \sum_{i} p_n(a_i) p_m(a_i)$$
(3.21b)

$$=\frac{1}{4}\langle p_n p_m \rangle \tag{3.21c}$$

$$=\frac{1}{4}\delta_{n,m}.$$
(3.21d)

Da die Hierarchie-Methode das Overhauserfeld in Potenzen der Kopplungen entwickelt, kommt mit jedem Level ein Faktor J_i unter der Summe hinzu. Gesucht ist daher allgemein die Tridiagonalgestalt

$$\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0\\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0\\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots\\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$
(3.22)

der hermiteschen Abbildung H mit

$$H: \ p(x) \to x \cdot p(x) \tag{3.23}$$

im Raum der Polynome.

 \rightarrow

Nach Festlegung von $p_1(x) \coloneqq x$ lässt sich die gewünschte Orthonormalbasis $\{p_1, \ldots, p_n\}$ bezüglich des Skalarproduktes (3.19) mithilfe des Lanczos-Algorithmus [20] nach

$$\rightarrow \qquad \qquad \tilde{p}_{n+1} = x \cdot p_n \tag{3.24a}$$

$$\rightarrow \qquad \langle \tilde{p}_{n+1} | p_{n-1} \rangle = \langle p_n | x | p_{n-1} \rangle = \beta_{n-1} \qquad (3.24b)$$

$$\rightarrow \qquad \langle \tilde{p}_{n+1} | p_n \rangle = \alpha_n \qquad (3.24c)$$

$$\tilde{\tilde{p}}_{n+1} = \tilde{p}_{n+1} - \alpha_n p_n - \beta_{n-1} p_{n-1}$$
(3.24d)

$$\rightarrow \qquad \langle \tilde{p}_{n+1} | \tilde{p}_{n+1} \rangle = \beta_n^2 \qquad (3.24e)$$

$$\Rightarrow \qquad \qquad p_{n+1} = \frac{1}{\beta_n} \tilde{\tilde{p}}_{n+1} \tag{3.24f}$$

ableiten. Prinzipiell besteht der Algorithmus aus der Anwendung der untersuchten Abbildung auf das Startpolynom, sowie einer Orthogonalisierung mithilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens. Für die sich ergebenden Polynome gilt außerdem die Rekursionsformel

$$x \cdot p_n = \beta_n p_{n+1} + \alpha_n p_n + \beta_{n-1} p_{n-1}.$$
(3.25)

Aus Gleichung (3.20) folgt für die zeitliche Entwicklung der orthonormalen Felder:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}_n = \sum_{i=1}^N p_n(a_i) \dot{\boldsymbol{S}}_i \tag{3.26a}$$

$$=\sum_{i=1}^{N} p_n(a_i)a_i(\boldsymbol{S}_0 \times \boldsymbol{S}_i)$$
(3.26b)

$$= \boldsymbol{S}_0 \times \sum_{i=1}^{n} a_i p_n(a_i) \boldsymbol{S}_i$$
(3.26c)

Und unter Verwendung von Formel (3.25) ergibt sich daraus schließlich die neue Hierarchie von Bewegungsgleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}_{n} = \boldsymbol{S}_{0} \times \left(\beta_{n}\boldsymbol{P}_{n+1} + \alpha_{n}\boldsymbol{P}_{n} + \beta_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\right).$$
(3.27)

in der Lanczos-Methode. Für die Simulation benötigt werden demnach die Koeffizienten $\{\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n\}$ und $\{\beta_1, \beta_2, ..., \beta_{n-1}\}$ der Matrix $\underline{\underline{H}}$, um damit die Dynamik der zu Simulationsbeginn gaußverteilten P_n -Felder zu berechnen. Die zeitliche Entwicklung des Zentralspins ergibt sich dann schließlich aus dem ersten Feld nach

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{P}_1 \times \boldsymbol{S}_0 \quad . \tag{3.28}$$

Um sich mit dem Schema der Berechnung der Dynamik der Felder in dieser Methode vertraut zu machen, empfiehlt sich eine schrittweise Betrachtung von Gleichung (3.26a). Aufgeführt sind jeweils das Level der Approximation und die entsprechend zu lösenden Bewegungsgleichungen.

Level 1:
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{P}_1 \times \boldsymbol{S}_0 \tag{3.29}$$

Level 2:
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{P}_1 \times \boldsymbol{S}_0 \tag{3.30}$$

 $\overline{\mathrm{d}t}$

 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{S}_0 =$

$$\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{S}_0 \times \alpha_1 \boldsymbol{P}_1 \tag{3.31}$$

Level 3:
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_{0} = \boldsymbol{P}_{1} \times \boldsymbol{S}_{0} \qquad (3.32)$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{S}_{0} \times (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{B}_{0} + \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{B}_{0}) \qquad (3.32)$$

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}_1 = \mathbf{S}_0 \times (\beta_1 \mathbf{P}_2 + \alpha_1 \mathbf{P}_1)$$
(3.33)
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}_2 = \mathbf{S}_0 \times (\alpha_2 \mathbf{P}_2 + \beta_1 \mathbf{P}_1)$$
(3.34)

Level 4:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{S}_{0} = \boldsymbol{P}_{1} \times \boldsymbol{S}_{0} \qquad (3.35)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{P}_{1} = \boldsymbol{S}_{0} \times (\beta_{1} \boldsymbol{P}_{2} + \alpha_{1} \boldsymbol{P}_{1}) \qquad (3.36)$$

$$\boldsymbol{S}_0 \times (\beta_1 \boldsymbol{P}_2 + \alpha_1 \boldsymbol{P}_1) \tag{3.36}$$

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{P}_2 = \boldsymbol{S}_0 \times (\beta_2 \boldsymbol{P}_3 + \alpha_2 \boldsymbol{P}_2 + \beta_1 \boldsymbol{P}_1) \quad (3.37)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{P}_3 = \boldsymbol{S}_0 \times (\alpha_3 \boldsymbol{P}_3 + \beta_2 \boldsymbol{P}_2) \quad (3.38)$$

$$\boldsymbol{S}_0 \times (\alpha_3 \boldsymbol{P}_3 + \beta_2 \boldsymbol{P}_2) \tag{3.38}$$

Level 5:

$$\boldsymbol{P}_1 \times \boldsymbol{S}_0 \tag{3.39}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{S}_0 \times (\beta_1 \boldsymbol{P}_2 + \alpha_1 \boldsymbol{P}_1)$$
(3.40)

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}_{2} = \mathbf{S}_{0} \times (\beta_{2} \mathbf{P}_{3} + \alpha_{2} \mathbf{P}_{2} + \beta_{1} \mathbf{P}_{1}) \quad (3.41)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}_{3} = \mathbf{S}_{0} \times (\beta_{3} \mathbf{P}_{4} + \alpha_{3} \mathbf{P}_{3} + \beta_{2} \mathbf{P}_{2}) \quad (3.42)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{P}_{4} = \mathbf{S}_{0} \times (\alpha_{4} \mathbf{P}_{4} + \beta_{3} \mathbf{P}_{3}) \quad (3.43)$$

$$\boldsymbol{S}_0 \times (\beta_3 \boldsymbol{P}_4 + \alpha_3 \boldsymbol{P}_3 + \beta_2 \boldsymbol{P}_2) \tag{3.42}$$

$$\boldsymbol{S}_0 \times (\alpha_4 \boldsymbol{P}_4 + \beta_3 \boldsymbol{P}_3) \tag{3.43}$$

Anschaulich wird hier auf dem jeweiligen Level die linke obere Quadratmatrix von $\underline{\underline{H}}$ mit der entsprechenden Größe ausgeschnitten.

Mithilfe dieser Methode der Verwendung orthonormaler Polynome zur Approximation der Badspinfluktuationen sollte die Genauigkeit bei der Berechnung der Zentralspindynamik mit dem jeweiligen Level der Approximation erheblich zunehmen, verglichen mit der vorangehenden ursprünglichen Hierarchie-Methode. Dies ist zu erwarten, da die Matrix \underline{H} , welche das System an Bewegungsgleichungen beschreibt, reell und symmetrisch und damit auch hermitesch ist. Während in der ursprünglichen Hierarchie-Methode exponentiell divergierende

Lösungen möglich waren, schließt die nun gegebene Hermitizität der Matrix solche Lösungen von vornherein aus. Hermitesche Matrizen haben stets reelle Eigenwerte, welche zu einfachen Präzessionen bei der zeitlichen Entwicklung der einzelnen Bewegungsgleichungen führen. Die mit dieser Methode berechneten Autokorrelationsfunktionen sollten daher deutlich stabiler verlaufen und die volle Simulation über einen signifikant größeren Zeitraum approximieren können.

3.3.2 Ergebnisse

In Abbildung 3.4 befindet sich der Verlauf der Korrelationsfunktion $\langle S_0^z(t) S_0^z(0) \rangle$ als Ergebnis der Lanczos-Methode für verschiedene Approximationslevel n_{\max} . Simuliert werden hier $N = 1000 \text{ mit } \gamma = 0.01$ exponentiell gekoppelte Badspins. Zur Bewertung der Genauigkeit der Methode ist erneut die volle Simulation aller Spins dargestellt. Um einen Vergleich zu den vorherigen Resultaten zu schaffen ist zusätzlich das entsprechende Ergebnis der Hierarchie-Methode auf Level $n_{\max} = 8$ bis $t = 100 [J_q^{-1}]$ aufgeführt.



Abbildung 3.4: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Lanczos-Rechnung für verschiedene Leveltiefen n_{max} und exponentielle Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der herkömmlichen Hierarchie-Methode auf Level $n_{\text{max}} = 8$ und die volle Simulation.

Für $n_{\text{max}} = 1$ ergibt sich auch in der Lanczos-Methode erwartungsgemäß wieder die Merkulov-Kurve. Schon ab $n_{\text{max}} = 2$ übertrifft die Lanczos-Methode in Bezug auf die Genauigkeit der Simulation bereits die herkömmliche Hierarchie-Methode mit $n_{\text{max}} = 8$, dessen resultierende Kurve lediglich im Anfangsbereich die volle Simulation sinnvoll approximiert. Dies zeigt klar, wie enorm der Gewinn an Genauigkeit durch die Verwendung einer orthonormalen Basis für die Overhauserfeldhierarchie ist. Zudem scheint die Lanczos-Rechnung schnell zu konvergieren, da die volle Simulation bereits mit $n_{\text{max}} = 8$ für Zeiten bis $t \approx 600 [J_q^{-1}]$ sehr genau angenähert wird.



Abbildung 3.5: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Lanczos-Rechnung für verschiedene Leveltiefen n_{\max} und linearen Kopplungen mit N = 1000 Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation.

Abbildung 3.5 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für die linearen Kopplungen für N = 1000Spins. Es fällt auf, dass die Lanczos-Rechnung für diese Kopplungsverteilung schneller zu konvergieren scheint. Mit $n_{\text{max}} = 8$ liegt das Ergebnis bereits bis $t = 1000 \left[J_q^{-1}\right]$ nahezu exakt auf dem der vollen Simulation. Der Grund für das unterschiedliche Konvergenzverhalten der beiden Kopplungen liegt im Verlauf der Verteilungen. Während in der linearen Verteilung eine klare Hierarchie von großen zu kleinen Werten existiert, tauchen in den exponentiell verteilten Kopplungen viele kleine Werte auf, die alle etwa in der selben Größenordnung liegen, wodurch eine wesentliche und nicht vernachlässigbare Langzeitdynamik ensteht. Um dieses kompliziertere Verhalten in der Simulation zu erfassen muss daher im Falle der exponentiellen Verteilung genauer, also mit größerem n_{max} approximiert werden.



Abbildung 3.6: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Lanczos-Rechnung für größere Leveltiefen $n_{\text{max}} = 8, 16$ und 32 und exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation.

Abschließend ist in Abbildung 3.6 gezeigt, dass die volle Simulation selbst für sehr große Zeiten von $t = 10\,000 \, \left[J_q^{-1}\right]$ problemlos durch die Lanczos-Rechnung genähert werden kann. Dargestellt ist das Ergebnis der Rechnung für die exponentielle Kopplungsverteilung mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 Spins mit $n_{\text{max}} = 8, 16$ und 32. Für $n_{\text{max}} = 32$ liegt die Näherung bis $t = 1000 \, \left[J_q^{-1}\right]$ quasi exakt auf der vollen Simulation.

Es stellt sich nun noch die Frage, wie die Leveltiefe n genau zu wählen ist, um eine verlässliche Approximation bis zu einem gewünschten Zeitpunkt t_{max} zu erhalten. Hierzu muss zunächst eine obere Schranke $\xi > 0$ für die maximale relative Abweichung

$$\Delta_{\text{approx.}} = \left| \frac{S_{\text{voll}} - S_{\text{approx.}}}{S_{\text{voll}}} \right|$$
(3.44)

der approximativen Lösung nach der Lanczos-Methode von der vollen Simulation definiert werden. Der Übersichtlichkeit halber wurde hier die Abkürzung $S = \langle S_0^z(t) S_0^z(0) \rangle$ eingeführt. Aufgrund der statistischen Schwankungen in den Daten kann diese obere Schranke nicht beliebig klein gewählt werden. Für Werte $\xi < 0.15$ werden die Ergebnisse unrealistisch, weshalb die Schranke auf 15% gesetzt wurde. Der obere Teil von Abbildung 3.7 zeigt eine Darstellung der Simulationszeiten t_{\max} , bis zu denen die Näherungslösung die volle Simulation im Rahmen der definierten Schranke beschreibt, in Abhängigkeit von der Leveltiefe n_{\max} . Für alle $t > t_{\max}$ ist stets $\Delta_{approx.} > \xi$. Im unteren Teil wurden die gewonnenen Daten zusätzlich logarithmiert dargestellt, um ein Potenzgesetz für das Verhalten von t_{\max} bei steigendem n ableiten zu können. Eine lineare Regression der logarithmierten Daten, welche ebenfalls dargestellt ist, liefert eine Steigung der Geraden von $a = 1.9718 \pm 0.0004$, was einen näherungsweise quadratischen Zusammenhang zwischen realistisch approximierbarer Simulationszeit und Leveltiefe offenbart. Das bedeutet, möchte ein Anwender der Methode die erreichbare Simulationszeit vervierfachen, so muss er in guter Näherung die Leveltiefe verdoppeln.



Abbildung 3.7: In der oberen Abbildung ist der Zeitpunkt t_{max} , bis zu welchem die approximative Lösung die volle Simulation im Rahmen der Schranke $\xi = 0.15$ für die relative Abweichung beschreibt, in Abhängigkeit der Leveltiefe n dargestellt. In der unteren Abbildung sind die Daten logarithmiert dargestellt. Eine ebenfalls abgebildete lineare Regression liefert eine Gerade mit Steigung $a = 1.9718 \pm 0.0004$.

3.3.3 Limes unendlich vieler Badspins

Um die physikalischen Gegebenheiten innerhalb eines Quantenpunktes zu simulieren, genügt eine Betrachtung von N = 1000 Badspins nicht. Unter gewissen Umständen ist es in der Lanczos-Methode aber möglich durch Bestimmung des Grenzwertes $\lim_{N\to\infty} \langle p_n | p_m \rangle$ den Fall unendlich vieler Badspins zu simulieren. Dies sollte den realen physikalischen Gegebenheiten innerhalb eines Quantenpunktes mit $N = 10^5 - 10^6$ sehr nahe kommen. Sei

$$p_n(a_i)p_m(a_i) = P_{n+m}(a_i) = \sum_{j=1}^{n+m} c_j a_i^j$$
(3.45)

mit den Koeffizienten c_i des beim Skalarprodukt auftretenden Produkt-Polynoms. Dann folgt:

$$\lim_{N \to \infty} \langle p_n | p_m \rangle = \lim_{N \to \infty} \sum_{i=1}^N P_{n+m}(a_i)$$
(3.46)

$$= \lim_{N \to \infty} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n+m} c_j a_i^j$$
(3.47)

$$= \lim_{N \to \infty} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n+m} c_j \left(a_0 e^{-(i-1)\gamma} \right)^j$$
(3.48)

$$= \lim_{N \to \infty} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=1}^{n+m} c_j a_0^j e^{-i\gamma j}$$
(3.49)

$$=\sum_{j=1}^{n+m} c_j a_0^j \lim_{N \to \infty} \sum_{i=0}^{N-1} \left(e^{-\gamma j} \right)^i$$
(3.50)

$$=\sum_{j=1}^{n+m} \frac{c_j a_0^j}{1 - e^{-\gamma j}}$$
(3.51)

für den Grenzfall $N \to \infty$. Dieser Ausdruck geht mit $\sum_i |a_i|^n < \infty$ und ist damit konvergent. Auf diesem Weg lassen sich also für den Fall exponentiell gekoppelter Badspins sogar unendlich große Quantenpunkte simulieren. Diese Möglichkeit war so vorher nicht gegeben. Eine Simulation von $N = \infty$ Badspins durch Lösen aller Differenzialgleichungen ist logischerweise ausgeschlossen. Hierbei handelt es sich um eine besondere Eigenschaft der Methode.

Abbildung 3.8 zeigt einen Vergleich zwischen einer Simulation mit N = 1000 und einer Rechnung für den Limes $N \to \infty$. Gerechnet wurde jeweils mit $n_{\max} = 32$ und exponentiell verteilten Kopplungen mit $\gamma = 0.01$. Augenscheinlich existiert selbst auf der Skala $t \leq 10\,000 \, [J_q^{-1}]$ kaum ein Unterschied zwischen beiden Rechnungen. Begründen lässt sich diese Beobachtung dadurch, dass die kleinsten Kopplungen für N = 1000 Spins bereits bis auf $J_{\min} \approx 6.45 \cdot 10^{-6}$ abfallen und damit nahezu verschwinden, weshalb die Erweiterung auf $N = \infty$ kaum mehr ins Gewicht fällt.



Abbildung 3.8: Lanczos-Rechnung für $n_{\text{max}} = 32$ mit exponentiell verteilten Kopplungen und $\gamma = 0.01$. Dargestellt sind die Ergebnisse für N = 1000 Spins und $N = \infty$ Spins.

3.4 Spektraldichte-Methode

3.4.1 Untersuchung der Lanczos-Koeffizienten

Im vorangegangenen Kapitel wurden unter Verwendung des Lanczos-Algorithmus Koeffizienten α_n und β_n berechnet, mit denen sich Felder P_n bestimmen ließen, die das Verhalten des Overhauserfeldes approximieren. Im Folgenden soll nun eine neue Methode motiviert werden, in welcher die Dynamik des Overhauserfeldes unter Betrachtung der spektralen Dichte des Systems simuliert wird. Zunächst ist zu zeigen, dass die Lanczos-Koeffizienten unter geeigneten Bedingungen näherungsweise konvergieren. In den Abbildungen 3.9 und 3.10 sind die sich aus der exponentiellen Kopplungsverteilung ergebenden α_n und β_n gegen die Leveltiefe n im Lanczos-Algorithmus dargestellt. Zusätzlich sind die ersten 100 Kettenbruch-Koeffizienten a_n und b_n nach Pettifor und Weare [21] für eine lineare Spektraldichte der Form

$$n_0(E) = \frac{W}{2}E \qquad J_{\min} \le E \le J_{\max} \tag{3.52}$$

mit aufgeführt, wobei $W = J_{\text{max}} - J_{\text{min}}$ das Spektrum der Kopplungen im System beschreibt. Die Annahme einer linearen Spektraldichte erscheint hier zunächst noch willkürlich, wird sich jedoch im weiteren Verlauf als sinnvoll erweisen. Die Kettenbruchkoeffizienten ergeben sich für eine Funktion der Form aus Gleichung (3.52) nach

$$a_n = \frac{W}{2} \left[\frac{1}{(2(n-1)+1)(2(n-1)+3)} + 1 \right] , \qquad (3.53)$$

$$b_n = \frac{W}{2} \sqrt{\frac{4n^2(n+1)^2}{2n(2n+1)^2(2n+2)}}$$
(3.54)



Abbildung 3.9: Kettenbruchkoeffizienten für eine lineare Gewichtsfunktion a_n und Lanczos-Koeffizienten für die exponentiellen Kopplungen α_n mit relativer Abweichung Δ .



Abbildung 3.10: Kettenbruchkoeffizienten für eine lineare Gewichtsfunktion b_n und Lanczos-Koeffizienten für die exponentiellen Kopplungen β_n mit relativer Abweichung Δ .

Außerdem ist die relative Abweichung

$$\Delta = \frac{\alpha_n - a_n}{\alpha_n} \tag{3.55}$$

bzw.
$$\Delta = \frac{\beta_n - b_n}{\beta_n}$$
(3.56)

der Lanczos-Koeffizienten zu den Kettenbruchkoeffizienten ebenfalls dargestellt. Offenbar herrscht hier schon für einen vergleichsweise großen Kopplungsparameter $\gamma = 0.01$ eine gute Übereinstimmung. Die Lanczos-Koeffizienten scheinen bis zu einer Tiefe $n \approx 40$ nahezu stabil zu sein, fallen dann jedoch langsam ab. Eine Verkleinerung des Parameters um eine Größenordnung auf $\gamma = 0.001$ führt dazu, dass die Lanczos-Koeffizienten nach einer anfänglichen Dynamik über die gesamte Rechnung bis zu einer Tiefe von n = 100 in guter Näherung konstant bleiben. Dies lässt den Schluss zu, dass sich das System im Falle exponentieller Kopplungen und ausreichend kleinem Parameter γ trefflich durch eine lineare Spektraldichte beschreiben lassen müsste.

Zur weiteren Motivation dieses Vorgehens soll im nächsten Abschnitt die Gewichtsfunktion sowohl für die exponentielle als auch für die lineare Kopplungsverteilung explizit berechnet werden.

3.4.2 Kettenbruchdarstellung der Spektraldichte

Die Spektraldichte ρ einer Resolvente $R(\omega)$ lässt sich nach

$$\rho(\epsilon) = -\frac{1}{\pi}\Im(R(\omega)) \tag{3.57}$$

durch

$$R(\omega) := \left[\frac{1}{\omega - \underline{\underline{T}}}\right]_{11} \tag{3.58}$$

mit retardierter Frequenz $\omega = \epsilon + i\delta$ ausdrücken. Der Index verweist hier auf das linke obere Element der inversen Matrix. Die Resolvente von <u>T</u> lässt sich wiederum nach

$$R(\omega) = \frac{1}{\omega - \alpha_1 - \frac{\beta_1^2}{\omega - \alpha_2 - \frac{\beta_2^2}{\omega - \dots}}}$$
(3.59)

als Kettenbruch entwickeln. Im Folgenden soll durch explizite Berechnung des Kettenbruchs (3.59) die Form der Spektraldichte $\rho(\epsilon)$ der Lanczos-Matrix <u>T</u> für die beiden Kopplungsverteilungen in (2.4) und (2.5) untersucht werden. Es wird sich zeigen, dass bei Verbreiterung der in $\rho(\epsilon)$ auftretenden δ -Funktionen durch Annahme eines endlichen Imaginärteils δ der retardierten Frequenz ω die Spektraldichte in eine kontinuierliche Funktion übergeht. Die δ -Funktionen werden dann zu Lorentz-Kurven.

Abbildung 3.11 zeigt die Darstellung des Kettenbruchs der Lanczos-Koeffizienten α_n und β_n der exponentiellen Kopplungsverteilung mit $N = \infty$ Kopplungen und $\gamma = 10^{-5}$. Ausgewertet wurde der zugehörige Kettenbruch bis zu einer Tiefe d = 100. Offensichtlich geht die peakartige Struktur der spektralen Dichte schon bei einer vergleichsweise geringen Verbreiterung des Imaginärteils von $\delta = 0.0001$ in eine glatte, lineare Funktion über. Dass die Annahme aus dem vorherigen Kapitel einer linearen Spektraldichte für die exponentiellen Kopplungen gerechtfertigt war, wird damit erneut bestätigt, nachdem zuvor schon eine Übereinstimmung der Kettenbruch- mit den Lanczos-Koeffizienten aufgezeigt werden konnte.

In Abbildung 3.12 ist die gleiche Rechnung für die lineare Kopplungsverteilung mit N = 100Kopplungen gezeigt. Der Kettenbruch wurde ebenfalls bis zu einer Tiefe d = 100 ausgewertet.



Abbildung 3.11: Kettenbruchdarstellung der Spektraldichte für die exponentielle Kopplungsverteilung mit $N = \infty$ Kopplungen und $\gamma = 10^{-5}$.



Abbildung 3.12: Kettenbruchdarstellung für die lineare Kopplungsverteilung mit N = 100 Kopplungen.

Auch in diesem Fall entsteht offenbar bereits bei einer Verbreiterung von $\delta = 0.003$ eine glatte, hier parabelförmige Funktion. Dass die gezeigten Kurven nicht abrupt enden, sondern vergleichsweise langsam und gleichmäßig abfallen, ist der jeweils gewählten Verbreiterung geschuldet. Die gezeigten Resultate festigen die Annahme, dass sich für die beiden untersuchten Kopplungsverteilungen eine polynomielle Spektraldichte finden lässt, was eine analytische Betrachtung dieses Zusammenhangs motiviert.

An dieser Stelle soll jedoch noch auf die beiden definierenden Eigenschaften der Spektraldichten hingewiesen werden. Zunächst ist die Fläche unter den Kurven in den gezeigten Fällen jeweils gleich und auf eins normiert. Weiterhin erstreckt sich der Definitionsbereich der beiden Spektraldichten von $\epsilon_{\min} = 0$ bis zu einem gewissen Wert ϵ_{\max} , welcher der größten Kopplung a_{\max} im System entspricht. Für die dargestellten Fälle berechnet sich dieser Wert zu

$$\epsilon_{\max} = \sqrt{1 - e^{-2\gamma}} \tag{3.60}$$

$$\approx 0.0045\tag{3.61}$$

für die exponentiellen Kopplungen und zu

$$\epsilon_{\max} = \sqrt{\frac{6N}{2N^2 + 3N + 1}} \tag{3.62}$$

$$\approx 0.1719\tag{3.63}$$

für die linearen Kopplungen. Dies entspricht jeweils den Vorfaktoren der Kopplungsverteilungen in den Gleichungen (2.4) (im Limes $N \to \infty$) und (2.5). Die Näherungen

$$\sqrt{1 - e^{-2\gamma}} \approx \sqrt{2\gamma} \quad \forall \gamma \ll 1 , \qquad (3.64a)$$

$$\sqrt{\frac{6N}{2N^2 + 3N + 1}} \approx \sqrt{\frac{3}{N}} \quad \forall N \gg 1$$
(3.64b)

werden im Verlauf der Arbeit noch Verwendung finden. Es wird sich im nächsten Kapitel zeigen, dass der Wert $\epsilon_{\max} = a_{\max}$ der größten Kopplung im System von Bedeutung für das Verhalten der Autokorrelation des Zentralspins im Langzeitlimes ist. Nun wird jedoch im nächsten Abschnitt zunächst ein analytischer Weg zur Berechnung der spektralen Dichte des Systems beschrieben.
3.4.3 Herleitung einer kontinuierlichen Spektraldichte

Für die zeitliche Entwicklung der in der Lanczos-Methode verwendeten P-Felder mit Größe L gilt allgemein:

$$\dot{\boldsymbol{P}}_{j} = \boldsymbol{S}_{0} \times \sum_{m=1}^{L} T_{jm} \boldsymbol{P}_{m} , \qquad (3.65)$$

wobei

$$\underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0\\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0\\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots\\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} .$$
(3.66)

eine reelle und symmetrische Tridiagionalmatrix mit den Eigenwerten ϵ_{α} und den orthonormierten Eigenvektoren u_{α} ($\alpha \in 1...L$) beschreibt. Wir definieren nun neue Vektoren

$$\boldsymbol{Q}_{\alpha}(t) = \sum_{m=1}^{L} (\boldsymbol{u}_{\alpha})_m \boldsymbol{P}_m(t) . \qquad (3.67)$$

Eingesetzt in (3.65) ergibt sich

$$\dot{\boldsymbol{Q}}_{\alpha} = \boldsymbol{S}_{0} \times \sum_{m,j=1}^{L} \boldsymbol{u}_{\alpha j} T_{jm} \boldsymbol{P}_{m}(t)$$

$$= \boldsymbol{S}_{0} \times \epsilon_{\alpha} \sum_{m=1}^{L} (u_{\alpha})_{m} \boldsymbol{P}_{m} . \qquad (3.68)$$

Und damit die Darstellung

$$\dot{\boldsymbol{Q}}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} \boldsymbol{S}_{0} \times \boldsymbol{Q}_{\alpha} \tag{3.69}$$

von Gleichung (3.65) in einer diagonalen Basis. Aufgrund der Orthogonalität der Eigenvektoren u_{α} , sind die Anfangswerte der Vektoren Q_{α} ebenfalls gaußverteilt und unkorreliert.

Im Folgenden soll nun gezeigt werden, dass sich für die Matrix \underline{T} eine Spektraldichtefunktion berechnen lässt, welche es ermöglicht, die zur Lösung des Gleichungssystems in der diagonalen Basis benötigten Frequenzen ϵ_{α} mit den jeweiligen zugehörigen Gewichten im Kontinuumslimes zu bestimmen.

Integration von (3.69) führt auf

$$\boldsymbol{Q}_{\alpha}(t) = \underline{D}_{\alpha}(t)\boldsymbol{Q}_{\alpha}(0) \tag{3.70a}$$

mit
$$\underline{\underline{D}}_{\underline{\alpha}}(t) = \mathcal{T}\left[e^{\epsilon_{\alpha}\int_{0}^{t}\underline{\underline{M}}(t')\mathrm{d}t'}\right],$$
 (3.70b)

wobei \mathcal{T} den Zeitordnungsoperator darstellt [22]. \underline{M} ist hier die lineare Abbildung für die

$$\underline{M}(t)\boldsymbol{v} \coloneqq \boldsymbol{S}_0(t) \times \boldsymbol{v} , \qquad (3.71)$$

mit einem beliebigen Vektor $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^3$ gilt. Ist $\boldsymbol{S}_0(t)$ bekannt, so lässt sich Gleichung (3.70b) leicht numerisch lösen.

Die Dynamik des Zentralspins ergibt sich schließlich wie zuvor aus

$$\dot{\boldsymbol{S}}_0(t) = \boldsymbol{P}_1 \times \boldsymbol{S}_0(t). \tag{3.72}$$

Es wird also das Feld P_1 benötigt, welches sich mithilfe der inversen Transformation

$$\boldsymbol{P}_{m} = \sum_{\alpha=1}^{L} (u_{\alpha}^{*})_{m} \boldsymbol{Q}_{\alpha}(t)$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{P}_{1} = \sum_{\alpha=1}^{L} (u_{\alpha}^{*})_{1} \boldsymbol{Q}_{\alpha}(t)$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{L} (u_{\alpha}^{*})_{1} \underline{\underline{D}}_{\alpha}(t) \boldsymbol{Q}_{\alpha}(0)$$
(3.73b)

berechnen lässt. Die Gleichungen (3.69) (3.72) und (3.73b) bilden zusammen ein geschlossenes Gleichungssystem, welches es sinnvoll zu approximieren gilt. Eine Möglichkeit wäre es, die Tridiagonalmatrix $\underline{\underline{T}}$ auf Dimension $d \ll L$ zu trunkieren, was mathematisch dem bisherigen Vorgehen entsprechen würde, bis auf die Tatsache, dass die Differenzialgleichungen nun in einer diagonalen Basis dargestellt sind.

Eine andere Möglichkeit besteht im Einführen eines Kontinuumslimes

$$\rho(\epsilon) = \sum_{\alpha} |u_{\alpha 1}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\alpha}) \tag{3.74}$$

für die Zustandsdichte des Systems. Da die Matrix \underline{T} reell-symmetrisch ist, können alle Eigenvektoren u_{α} ebenfalls reell gewählt werden. Man kann nun das Intervall $I = [a_{\min}, a_{\max}]$ beliebig diskretisieren. Anschaulich werden hier mehrere Badspins um eine Frequenz in der Spektraldichte zu einem neuen "Pseudospin" zusammengefasst. Für große Systemgrößen N lässt sich $\rho(\epsilon)$ als eine kontinuierliche Verteilung mit einem kompakten Träger $I = [a_{\min}, a_{\max}]$ nähern.

Die Kopplungen im System seien allgemein durch

$$a_i = Af(\gamma \cdot i), \quad i \in \{1, ..., N\}$$
(3.75)

mit einer glatten und monotonen Funktion f(x) mit Maximalwert $f(x_{\max}) = 1$ im Intervall $x \in [0, x_0]$ gegeben. Der Parameter $\gamma \ll 1$ ist hierbei ausreichend klein, sodass auftretende Summen in guter Näherung durch Integrale approximiert werden können. Aus der Normierung der Kopplungen ergibt sich

$$1 = \sum_{i} a_{i}^{2} = \frac{A^{2}}{\gamma} \underbrace{\int_{0}^{x_{0}} f^{2}(x) dx}_{I_{f}}$$

$$\Leftrightarrow \qquad A = \sqrt{\frac{\gamma}{I_{f}}} .$$
(3.76a)
(3.76b)

Die orthogonalen Polynome $p_n(a) = a\tilde{p}_{n-1}$ der verwendeten Basis enthalten alle einen linearen Faktor. Ihr Skalarprodukt lässt sich daher im Kontinuumslimes zu

$$\delta_{nm} = \sum_{i} a_{i}^{2} \tilde{p}_{n-1}(a_{i}) \tilde{p}_{m-1}(a_{i})$$

=
$$\int_{0}^{x_{0}} A^{2} f^{2}(x) \tilde{p}_{n-1}(Af(x)) \tilde{p}_{m-1}(Af(x)) \frac{\mathrm{d}x}{\gamma}$$
(3.77)

umschreiben. Mit der Substitution

 \Rightarrow

 \Rightarrow

$$a = Af \tag{3.78a}$$

$$\Leftrightarrow \quad \mathrm{d}a = Af'\,\mathrm{d}x \tag{3.78b}$$

lässt sich der Ausdruck schließlich in die Form

$$\delta_{nm} = \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} \underbrace{\frac{a^2}{\gamma A|f'|}}_{W(a)} \tilde{p}_{n-1}(a) \, \tilde{p}_{m-1}(a) \, \mathrm{d}a \tag{3.79}$$

bringen, wo sich W(a) als Gewichtsfunktion der orthogonalen Polynome identifizieren lässt. Nach der Theorie der orthogonalen Polynome [23] handelt es sich hierbei ebenfalls um die spektrale Dichte:

$$\rho(a) = W(a) = \frac{a^2}{\gamma A |f'(a)|}.$$
(3.80)

Für die exponentiell abfallenden Kopplungen ergibt sich aus der Rechnung explizit:

$$a_i = \sqrt{2\gamma} e^{-(i-1)\gamma}, \quad i \in \{1, ..., \infty\}$$
 (3.81a)

$$f(x) = e^{-x}, \quad x_0 = \infty$$
 (3.81b)

$$\Rightarrow \qquad |f'(x)| = |-e^{-x}| = f(x) \tag{3.81c}$$

$$\rho(a) = \frac{a^2}{\gamma A|f'|} = \frac{a}{\gamma} .$$
(3.81d)

Im speziellen Fall der exponentiellen Kopplungen verläuft die spektrale Dichte also linear im Intervall $a \in [0, \sqrt{2\gamma}]$.

Für die linear abfallenden Kopplungen ergibt sich aus der Rechnung explizit:

$$a_i = \sqrt{\frac{6N}{2N^2 + 3N + 1}} \frac{N + 1 - i}{N} , \quad i \in \{1, \dots, N\}$$
(3.82a)

$$\Rightarrow \qquad f(x) = x , \quad x_0 = 1 \tag{3.82b}$$

$$\Rightarrow \qquad I_f = \int_0^1 x^2 = \frac{1}{3} \tag{3.82c}$$

$$\Rightarrow \qquad |f'(x)| = 1 \tag{3.82d}$$

$$\Rightarrow \qquad \rho(a) = \frac{A^2 f^2}{\gamma A} = \frac{a^2}{\gamma^{\frac{3}{2}} \sqrt{3}} . \qquad (3.82e)$$

Im speziellen Fall der linearen Kopplungen verläuft die spektrale Dichte also quadratisch im Intervall $a \in [0,\sqrt{3\gamma}]$, wobei der Entwicklungsparameter

$$\gamma = \frac{1}{N} \tag{3.83}$$

hier der inversen Anzahl Badspins entspricht.

Im eingeführten Kontinuumslimes berechnet sich das für die Bestimmung der Zentralspindynamik benötigte Feld ${\pmb P}_1$ nun nach

$$\boldsymbol{P}_{1}(t) = \sum_{i=1}^{n} \sqrt{W_{i}} \, \boldsymbol{Q}_{i}(t) \tag{3.84}$$

mit aus der Spektraldichte resultierenden Gewichten $W_i = |u_{\alpha 1}|^2$. Insbesondere lässt sich nun die Diskretisierung der ϵ_i frei wählen.

3.4.4 Diskretisierung

Nachdem soeben mit der Spektraldichte-Methode ein Konzept hergeleitet und präsentiert wurde, in welcher die analytisch bestimmte Gewichtsfunktion des Systems zur Berechnung der Overhauserfelddynamik verwendet werden kann, stellt sich nun die Frage nach der optimalen Diskretisierung. Diese kann zunächst nach Belieben erfolgen, sollte jedoch so gewählt werden, dass der Zeitraum, in welcher sich die volle Simulation exakt approximieren lässt, maximal wird. Ein erster naiver Ansatz wäre eine lineare Diskretierung mit äquidistanten Stützstellen \tilde{u}_i im Intervall $I = [a_{\min}, a_{\max}]$. Es zeigt sich jedoch, dass es insbesondere in Bezug auf das Langzeitverhalten des Zentralspins sinnvoll ist, eine exponentielle Diskretisierung vorzunehmen, bei welcher viel Gewicht auf den kleinen Kopplungen liegt. Es hat sich als effektiv herausgestellt zunächst äquidistante Stützstellen zu wählen, welche anschließend systematisch zu kleineren Frequenzen hin verschoben werden. Hierzu muss das Intervall I zu Anfang in n kleinere Intervalle geteilt werden, wobei n der für die Simulation gewünschten Anzahl an Frequenzen und damit der Anzahl zu lösender Bewegungsgleichungen entspricht. Für die n + 1 Intervallgrenzen gilt dann

$$\tilde{u}_i = a_{\max} - \frac{a_{\max} - a_{\min}}{n} i, \quad i \in [0, n].$$
(3.85)

Anschließend werden die Grenzen nach $\tilde{u}_i \to u_i = \lambda^i \tilde{u}_i$ mit einem Faktor $0 < \lambda^i < 1$ transformiert, der so gewählt wird, dass die nach der Verschiebung kleinste auftauchende Frequenz sich zu $\epsilon_{\min} = 2\pi/t_{\max}$ ergibt. Es gilt dann:

$$\frac{a_{\max} - a_{\min}}{n} \cdot \lambda^n = \frac{2\pi}{t_{\max}} \tag{3.86a}$$

$$\Leftrightarrow \lambda = \left(\frac{2\pi n}{\left(a_{\max} - a_{\min}\right)t_{\max}}\right)^{\frac{1}{n}} . \tag{3.86b}$$

Der Zeitraum $t \in [0, t_{\text{max}}]$ entspricht der gesamten Simulationszeit. Die Idee hierbei ist, dass ein Badspin erst dann zur Dephasierung des Zentralspins beitragen kann, wenn er sich einmal vollständig um sich selbst (um 2π) gedreht hat. Diese Wahl der Diskretisierung sorgt dafür, dass alle im System befindlichen Pseudospins mit den Frequenzen ϵ_i während der Simulation mindestens eine komplette Präzessionsbewegung durchführen, wodurch die Approximation bis zum Zeitpunkt t_{max} in guter Übereinstimmung mit der vollen Simulation liegen sollte. Nach der Transformation der Intervallgrenzen berechnen sich die gesuchten Frequenzen dann als Mediane ϵ_i der Intervalle, sodass

$$\int_{u_{i-1}}^{\epsilon_i} \rho(\epsilon) \mathrm{d}\epsilon = \int_{\epsilon_i}^{u_i} \rho(\epsilon) \mathrm{d}\epsilon.$$
(3.87)

Für die entsprechenden Gewichte gilt schließlich

$$W_i = \int_{u_{i-1}}^{u_i} \rho(\epsilon) \mathrm{d}\epsilon \ , \quad i \in [1,n].$$
(3.88)

In Abbildung 3.13 befindet sich ein Vergleich der mit der Spektraldichtemethode mit $N = \infty$ Badspins erzielten Resultate für eine einfache äquidistante und die vorgestellte exponentielle Diskretisierung.



Abbildung 3.13: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode ohne Kontinuumslimes für lineare und exponentielle Diskretierung in der Gewichtsfunktion. Gerechnet wurde mit n = 32 Intervallen und exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und $N = \infty$ Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation für N = 1000 Spins.

Es wird sofort deutlich, wie wichtig die Art der Diskretierung für diese Methode ist. Während die aus der Rechnung mit linearer Diskretisierung resultierende Kurve schon für $t < 1000 \left[J_q^{-1}\right]$ merklich von der vollen Simulation abweicht, bleibt die Rechnung mit exponentieller Diskretisierung bis zum Simulationsende bei $t = 10\,000 \left[J_q^{-1}\right]$ quasi exakt. Stärker beginnt die Kurve mit linearer Diskretierung in etwa bei $t = (1400 - 1600) \left[J_q^{-1}\right]$ von der vollen Lösung

abzuweichen, was nach

$$\epsilon_{\min} \approx \frac{\sqrt{2\gamma}}{n} = \frac{2\pi}{t_{\max}} \tag{3.89a}$$

$$\Leftrightarrow \quad t_{\max} = \frac{64\pi}{\sqrt{0.02}} \approx 1422 \tag{3.89b}$$

konsistent zu den bisherigen Überlegungen ist. In der nächsten Passage werden die mit der Spektraldichte-Methode erzielten Ergebnisse für verschiedene Approximationslevel präsentiert.

3.4.5 Ergebnisse

In Abbildung 3.14 sind die aus der Spektraldichte-Methode resultierenden Kurven der Autokorrelationsfunktion des Zentralspins für exponentiell gekoppelte Badspins mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 dargestellt. Die Rechnung wurde für verschieden viele Stützstellen n in der Gewichtsfunktion durchgeführt.



Abbildung 3.14: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode mit exponentieller Diskretierung mit verschiedenen Intervallzahlen n und exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und N = 1000 Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation für N = 1000 Spins.

Erwartungsgemäß wird die Approximation der vollen Simulation mit steigender Anzahl an Stützstellen besser. Im Unterschied zur Lanczos-Methode vergrößert sich mit steigendem n jedoch nicht der Zeitraum, in welchem die Näherung deckungsgleich mit der exakten Lösung ist, sondern die gesamte Kurve scheint gegen die volle Simulation zu konvergieren. Für n = 8 gleicht der Verlauf der Kurve bis $t_{\text{max}} = 1000 [J_q^{-1}]$ bis auf einen vernachlässigbaren Offset (siehe Inset) dem der vollen Simulation.

Abbildung 3.15 zeigt die selbe Rechnung für die lineare Kopplungsverteilung. Das Verhalten der approximativen Methode ist hier sehr ähnlich. Wieder konvergiert die Näherung mit



Abbildung 3.15: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode mit exponentieller Diskretierung mit verschiedenen Intervallzahlen n und linearen Kopplungen mit N = 1000 Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation.

steigender Anzahl an Stützstellen gegen die exakte Lösung.

Es folgt nun im nächsten Abschnitt ein Vergleich zwischen der Lanczos-Methode und der Spektraldichte-Methode bezüglich Effizienz und Genauigkeit sowie eine Klassifikation der erzielten Resultate durch einen Vergleich der Laufzeiten der verschiedenen Programme.

3.5 Vergleich - Fazit

Nachdem in den vorherigen Kapiteln zwei Methoden zur effizienten Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im klassischen Zentralspinmodell vorgestellt wurden, soll nun ein Vergleich dieser beiden Methoden erfolgen. In Abbildung 3.16 sind die Ergebnisse der Methoden für ein Approximationslevel n = 16 zusammen mit der vollen Simulation geplottet.

Der Inset zeigt, dass die Verfahren bereits auf diesem Level bis $t = 1000 [J_q^{-1}]$ quasi exakt sind. Für längere Simulationszeiten bis $t_{\max} = 10\,000 [J_q^{-1}]$ zeigt die Lanczos-Methode hier jedoch deutliche Abweichungen, während die Spektraldichte-Methode selbst für so große Zeiten eine sehr hohe Genauigkeit aufweist. Ist es also das Ziel die Spindynamik über sehr lange Zeiten zu verfolgen, so scheint die Spekraldichte-Methode besser geeignet zu sein, da sie Stabilität über einen größeren Zeitraum verspricht. Für Simulationen mit $t_{\max} < 1000 [J_q^{-1}]$ ist jedoch die Lanczos-Methode vorteilhaft, da diese schon für kleine Approximationslevel eine gute Genauigkeit aufweist. Allgemein haben allerdings beide Methoden aufgrund ihrer schnellen Rechenzeit einen immensen Vorteil gegenüber der vollen Simulation, welcher nun noch quantitativ herausgearbeitet werden soll.



Abbildung 3.16: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode mit exponentieller Diskretierung sowie der Lanczos-Methode. Gerechnet wurde mit Level n = 16 und exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und $N = \infty$ Spins. Zum Vergleich das Ergebnis der vollen Simulation für N = 1000 Spins.

Um die gesamten Ergebnisse bezüglich der Effizienz der Rechnungen besser einordnen zu können folgt in Tabelle 3.1 ein Vergleich der Laufzeiten der beiden Simulationsprogamme untereinander und mit der vollen Simulation.

Methode		Laufzeit [h]
volle Simulation		1921.8
Lanczos	n = 8	33.8
	n = 16	56.7
	n = 32	97.9
Spektraldichte	n = 8	55.2
	n = 16	99.8
	n = 32	187.8

Tabelle 3.1: Vergleich der Laufzeiten der verschiedenen Simulationsprogramme für eine Berechnung von 200 000 Datenpunkten bis $t_{\text{max}} = 10\,000$ über 10⁶ Ensembles mit N = 1000 Spins. Durchgeführt wurden die Simulationen auf einer Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v3 mit einer Taktrate von 3.50 GHz.

Die Laufzeit der approximativen Methoden steigt erwartungsgemäß mit wachsendem n an, da die Anzahl zu lösender Bewegungsgleichungen wächst. Jedoch ist gerade die Lanczos-Methode für $n_{\text{max}} = 32$ noch um beinahe um einen Faktor 20 schneller als die volle Simulation, wobei die Rechnung, wie in Abbildung 3.6 zu sehen, schon bis $t_{\text{max}} = 10\,000 \, [J_q^{-1}]$ im Prinzip exakt ist. Der Gewinn an Effizienz unter Verwendung der beiden Methoden ist also beträchtlich. Die höhere Genauigkeit der Spektraldichte-Methode (siehe Abbildung 3.16) wird offenbar aufgewogen durch die längere Laufzeit des Programms, da es möglich wäre bei

gleicher Laufzeit in der Lanczos-Methode ein größeres Approximationslevel n zu realisieren. Davon abgeschen, dass beide Verfahren lediglich eine Approximation an die Physik bieten, indem die Rechnung nur bis zu einem bestimmten Level n durchgeführt wird, kommt die Lanczos-Methode ohne jedwede Näherung aus, während die Annahme einer kontinuierlichen Spektraldichte im System lediglich für kleine γ -Parameter korrekt ist. Der Unterschied in den Laufzeiten der beiden Näherungsmethoden lässt sich vermutlich auf den verschieden großen Rechenaufwand in den beiden Differenzialgleichungssystemen zurückführen. Insbesondere die Bestimmung von P_1 in Gleichung (3.84) in der Spektraldichte-Methode stellt einen mit ansteigendem Approximationslevel aufwendiger werdenden Rechenschritt dar, für den keine Analogie in der Lanczos-Methode existiert. Dies erklärt das Anwachsen des Unterschiedes in der Laufzeit beider Methoden mit n. Es soll an dieser Stelle noch darauf hingewiesen werden, dass die Laufzeit der Algorithmen stark von der Anzahl D zu berechnenden Datenpunkte abhängt. Im hier aufgeführten Beispiel wurden mit allen aufgeführten Algorithmen insgesamt 200000 Datenpunkte berechnet. Da zur Lösung der Bewegungsgleichungen ein Runge-Kutta-Algorithmus mit adaptiver Schrittweite gewählt wurde, würde eine Verringerung der verlangten Datenpunkte zu einer kürzeren Laufzeit des Algorithmus führen, solange die variable Schrittweite im Algorithmus $h_{\rm var} >= t_{\rm max}/D$.

Mit den präsentierten Methoden ist jetzt eine schnelle und effiziente Berechnung der Spindynamik möglich. Da nun effiziente Methoden zur Berechnung der Langzeitdynamik des Zentralspins zur Verfügung stehen, soll in den nächsten Kapiteln neben der Analyse des Langzeitverhaltens außerdem der Effekt des regelmäßigen Pulsens des Zentralspins über einen längeren Zeitraum untersucht werden. Aus den genannten Gründen ist es unwesentlich, welche der beiden Methoden hier verwendet wird und daher wird auf beide Methoden zurückgegriffen.

4 Langzeitverhalten des Zentralspins

4.1 Zeitliche Skalierung

Im Folgenden soll die Dynamik des Zentralspins für verschiedene Parameter γ und N in den beiden Kopplungsverteilungen untersucht werden, um daraus eventuell allgemeine Aussagen über das Langzeitverhalten ableiten zu können. Abbildung 4.1 zeigt die Autokorrelation für exponentiell gekoppelte Badspins für verschiedene Größenordnungen des γ -Parameters. Wie bereits in Abschnitt 2.1 angesprochen, legt γ fest wie schnell die Kopplungsverteilung abfällt. Je kleiner der Parameter, desto flacher ist der Verlauf der Verteilung. Es sind dann mehr Kopplungen der selben Größenordnung im System, welche miteinander konkurrieren, während für große γ -Parameter einige wenige große Kopplungen das System dominieren. Dementsprechend dauert die Dephasierung des Zentralspins und damit der Abfall der Autokorrelation für kleine γ länger, da die vielen schwächer gekoppelten Spins, welche mehr Zeit für eine volle Drehung und damit für einen Beitrag zur Dephasierung von S_0 benötigen, eine größere Rolle spielen. Zusätzlich fällt auf, dass zwar die Tiefe des ersten Minimums der Korrelation für große γ zu variieren scheint, nicht aber die Position auf der Zeitachse, welche durch die Definition der Energieskala J_q über die Normierung der Kopplungen festgelegt ist.



Abbildung 4.1: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode für $N = \infty$ Spins mit exponentieller Kopplung und verschiedenen γ .

Die für unterschiedliche γ verschieden schnell zerfallende Korrelationsfunktion legt den Schluss nahe, dass die Geschwindigkeit des Abfalls explizit vom Kopplungsparameter abhängt. Aus diesem Grund sind in Abbildung 4.2 nun die selben Daten dargestellt wie in Abbildung 4.1, bis auf die Tatsache, dass hier die Zeitachse mit $1/\sqrt{\gamma}$ skaliert wurde. Dieser Skalierungsfaktor wird motiviert durch die für die Spektraldichte charakteristische Größe $J_{\text{max}} = \epsilon_{\text{max}} \propto \sqrt{\gamma}$ der größten Kopplung im System, welche bereits in Abschnitt 3.4.2 Erwähnung fand. Sie und die Normierung sind die beiden definierenden Eigenschaften der Spektraldichte, was eine nähere Untersuchung der Bedeutung von $\sqrt{\gamma}$ für das Langzeitverhalten rechtfertigt.



Abbildung 4.2: Zeitlich skalierte Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode für $N = \infty$ Spins mit exponentieller Kopplung und verschiedenen γ .

Die Skalierung bewirkt offensichtlich, dass die verschiedenen Kurven für die unterschiedlichen γ -Parameter nun beinahe alle übereinander liegen (siehe Inset). Lediglich der Verlauf der Kurve mit dem größten betrachteten Kopplungsparameter $\gamma = 0.05$ scheint von diesem Verhalten abzuweichen. Dieses Skalierungsverhalten der Korrelationsfunktion deutet auf die Existenz einer zweiten Energieskala hin, welche für ausreichend kleine Kopplungsparameter γ von der ersten, über die Normierung der Kopplungen auf J_q festgelegten Energieskala separiert. Ist γ zu groß, so scheinen die beiden Energieskalen zu mischen und das Skalierungsargument greift nicht. Die Abbildungen 4.3 und 4.4 veranschaulichen diesen Sachverhalt zusätzlich für die lineare Kopplungsverteilung. Auch hier dauert der Abfall der Korrelation länger, je größer der Parameter N ist, da dieser aufgrund der Normierung festlegt, wie viele kleine Kopplungen im System auftauchen. Im Gegensatz zur exponentiellen Kopplungsverteilung konvergiert die Korrelationsfunktion hier allerdings rasch gegen einen konstanten Wert. Eine Skalierung der Zeitachse mit \sqrt{N} führt ebenfalls dazu, dass die Kurven für ausreichend große Systeme ($N \geq 10^3$) aufeinander fallen, was zeigt, dass die zweite Energieskala ebenfalls für diese Kopplungsverteilung nachweisbar ist.



Abbildung 4.3: Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode mit linearer Kopplung und verschiedenen N.



Abbildung 4.4: Zeitlich skalierte Spinkorrelationsfunktion als Ergebnis der Spektraldichte-Methode mit linearer Kopplung und verschiedenen N.

Die Normierung der Kopplungen über

$$\sum_{i} J_i^2 \coloneqq J_q^2 = 1 \tag{4.1}$$

entspricht in der Spektraldichte-Methode der Normierung der Fläche unter der Gewichtsfunktion ρ . Die andere Größe, welche ρ und damit die zweite Energieskala festlegt, ist das Maximum $J_{\text{max}} = \epsilon_{\text{max}}$ der Kopplungsverteilung, was den Definitionsbereich $[0, \epsilon_{\text{max}}]$ von ρ definiert. Die jeweiligen Werte für die beiden Kopplungen sind, wie bereits erwähnt,

exponentiell:
$$J_{\text{max}} = \sqrt{2\gamma}$$
, (4.2a)

linear:
$$J_{\text{max}} = \sqrt{3/N}$$
, (4.2b)

was aufgrund der gegebenen inversen Proportionalität in Konsistenz zu den Skalierungsfaktoren $1/\sqrt{\gamma}$ und \sqrt{N} steht. Die Dynamik von S_0 im Langzeitlimes hängt damit neben dem Verlauf der Kopplungsverteilung ausschließlich von J_{max} ab. Bemerkenswert ist zudem, dass die hiermit gefundene Universalität im Langzeitverhalten des Zentralspins unabhängig von der Form der Spektraldichte des Systems zu sein scheint. Sowohl für die lineare (exponentielle Kopplungen), als auch für die quadratische (lineare Kopplungen) Spektraldichte konnte das Skalierungsverhalten aufgezeigt werden.

4.2 Logarithmischer Abfall

Der Verlauf der Spinkorrelation im Langzeitverhalten des Zentralspins zeigt im Falle exponentiell verteilter Kopplungen einen sehr schwachen Abfall (siehe Abbildung 4.1). Mit den herkömmlichen Methoden (Lösung aller Bewegungsgleichungen) konnten bisher keine fundierten Aussagen über das Langzeitverhalten getroffen werden. Es war nicht klar, ob die Autokorrelation des Zentralspins irgendwann gegen eine Konstante konvergieren würde, wie im Falle äqudistant verteilter Kopplungen, oder ob die Korrelation möglicherweise vollständig zerfällt. Quantenmechanische Untersuchungen diese Zusammenhangs von Seifert et al. [24] konnten ein Gesetz

$$S_{\infty}(t) = \frac{A \cdot \ln^{B}\left(\frac{x}{C}\right)}{x}$$
(4.3)

für den Zerfall der Korrelation im Langzeitlimes im Falle exponentiell nach

$$J_i \propto \exp\left(-\frac{ix}{N}\right), \quad i \in [1,N]$$

$$(4.4)$$

verteilter Kopplungen etablieren, wobei

$$S_{\infty} = \lim_{t \to \infty} S(t) \tag{4.5}$$

eine untere Schranke für die Zentralspinkorrelation im Langzeitlimes beschreibt. Dieser Zusammenhang stellt eine logarithmische Korrektur dar zu dem von Chen et al. [11] vorgeschlagenen Gesetz

$$S(t) \propto \frac{1}{x^{\alpha}},\tag{4.6}$$

wobei der Exponent hier zu $\alpha = 1$ bestimmt wurde. Nach der Arbeit von Chen et al. können zu jedem Zeitpunkt t nur die Badspins S_i merklich zur Dephasierung des Zentralspins beitragen, deren Kopplungskonstanten der Relation $J_i t \geq 1$ genügen, die also zum Zeitpunkt tin etwa eine volle Präzession ausgeführt haben. Dies motiviert im Falle der exponentiellen Kopplungsverteilung die Hypothese $x \propto \ln(t)$ und damit eine Betrachtung des Problems in der Zeit. Die nun durch die erarbeiteten effizienten Methoden zur Berechnung der Zentralspindynamik gegebenen Möglichkeiten erlauben eine tiefergehende numerische Analyse des Langzeitverhaltens. Aufbauend auf den bisherigen Forschungen soll daher in diesem Abschnitt eine nichtlineare Ausgleichsrechnung für den Zusammenhang

$$S(t) = \frac{A \cdot \ln^B \left(\frac{\ln(t+t_0)}{C}\right)}{\ln(t+t_0)} + S_{\text{off}}$$

$$(4.7)$$

bezogen auf die aus der Spektraldichte-Methode gewonnenen Daten durchgeführt werden. Die Parameter t_0 und S_{off} lassen hierbei mögliche Verschiebungen in horizontaler und vertikaler Richtung zu. Die Potenz des Logarithmus im Zähler wurde von Seifert et al. auf B = 1 festgesetzt, was nun unter Analyse des zeitlichen Verlaufs der Korrelation verifiziert werden soll. Abbildung 4.5 zeigt den Verlauf der linearen Ausgleichsrechnung (4.7) für verschiedene γ -Parameter auf Level n = 32 der Spektraldichte-Methode mit $N = \infty$ Badspins in einfacher (oben) und doppelt logarithmischer (unten) Darstellung. Da der logarithmische Zerfall der Korrelation erst für große Zeiten t erwartet wird, werden für die nichtlineare Ausgleichsrechnung nur Werte für 1000 $[J_q^{-1}] \leq t \leq 10\,000$ $[J_q^{-1}]$ berücksichtigt. Die sich ergebenden Parameter befinden sich in Tabelle 4.2. Zum Vergleich sind die Parameter der Rechnung von Seifert et al. für das Intervall $x_{\text{start}} = 6$ bis $x_{\text{end}} = 64$ mit aufgeführt.

	$\gamma=0.01$	$\gamma=0.001$	$\gamma=0.00001$	Seifert et al.
A	0.048	0.070	0.128	0.053
B	0.997	0.996	1.002	1
C	0.022	0.039	0.041	0.114
t_0	-87.730	-83.370	-141.000	-
$S_{\rm off}$	-0.002	-0.009	-0.033	-
Δ^2_{Σ}	0.004	0.004	0.004	$9\cdot 10^{-4}$

Tabelle 4.1: Parameter A, B, C, t_0 und S_{off} der durchgeführten nichtlinearen Ausgleichsrechnung für verschiedene Kopplungsparameter γ . Die Summe der Abstandsquadrate Δ_{Σ}^2 stellt ein Maß für den Fehler bei der Interpolation dar. Die Ergebnisse für eine vergleichbare Rechnung von Seifert et al. sind ebenfalls mit aufgeführt. Der Exponent des Logarithmus wurde hier auf B = 1 festgesetzt.



Abbildung 4.5: Daten der Spektraldichte-Methode für verschiedene γ mit der jeweiligen nichtlinearen Ausgleichsrechnung (4.7) in einfacher (oben) und doppelt logarithmischer (unten) Darstellung.

Zunächst einmal fällt auf, dass der sich über die Summe der Abstandquadrate berechnende Fehler Δ_{Σ}^2 für die hier durchgeführte nichtlineare Ausgleichsrechnung vergleichsweise groß ausfällt. Der Grund dafür sind, neben der großen Anzahl von 45 000 berücksichtigten Datenpunkten, die selbst bei einer Mittelung über 10⁶ Badkonfigurationen noch signifikanten statistischen Schwankungen in den Daten. Trotz dieses vergleichsweise großen Fehlers scheint

die Ausgleichsrechnung den Verlauf der Daten sehr präzise zu beschreiben. Dies wird speziell bei Betrachtung der logarithmischen Darstellung deutlich. Übereinstimmung mit der Rechnung von Seifert et al. findet sich insbesondere in dem Ergebnis für den Parameter B, welcher hier für verschiedene γ in guter Näherung zu B = 1 bestimmt werden konnte. Diese Eigenschaft scheint unabhängig vom Kopplungsparameter zu sein, da sich das Ergebnis für Bselbst über mehrere Größenordnungen von γ kaum ändert. Auch der Parameter A scheint für $\gamma = 0.01$ in der selben Größenordnung, wie in der Rechnung von Seifert et al. zu liegen. Ein Vergleich der Ergebnisse für den Parameter C gestaltet sich aufgrund der Instabilität der angewandten nichtlinearen Ausgleichrechnung jedoch als schwierig. Hier hängt das Ergebnis stark von den gewählten Startwerten ab. Der Parameter t_0 bleibt in Anbetracht der Größe des betrachteten Zeitintervalls vernachlässigbar klein. Zur Motivation dieses Abschnitts wird zu Anfang die Frage aufgeworfen, ob die Autokorrelation des Zentralspins im betrachteten Modell auf null abfällt, oder irgendwann gegen eine Konstante konvergiert. Die Tatsache des negativen Vorzeichens in allen berechneten S_{off} lässt nun den Schluss zu, dass eine solche Konstante nicht existiert. Unter der Annahme, dass der gefundene logarithmische Funktionsverlauf die Physik für alle Zeiten $t \to \infty$ beschreibt, würde die Korrelation schließlich vollständig zerfallen. Dies steht jedoch im Widerspruch zu Ergebnissen weiterer Forschungen am klassischen Zentralspinmodell [25], welche rigorose untere Schranken für die Zentralspinkorrelation im Modell darlegen. Möglicherweise existiert noch eine weitere Zeitskala, die sich dem gefundenen logarithmischen Verlauf anschließt und die eine Konvergenz der Korrelation gewährleistet. Es ist jedoch fraglich, ob diese Zeitskala noch experimentell relevant ist, da das betrachtete Zeitintervall irgendwann so groß wird, dass andere im Modell nicht berücksichtigte physikalische Effekte (siehe Kapitel 1) dominieren.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass die Funktion in (4.7) eine sinnvolle Korrektur zu dem von Chen et. al vorgeschlagenen Gesetz darstellt. Der logarithmische Charakter des Zerfalls der Autokorrelation lässt sich im zeitlichen Verlauf nachweisen.

5 Pulse

5.1 Methodik und Pulsarten

Eine Möglichkeit, um der Dephasierung des Zentralspins im Experiment entgegenzuwirken und längere Kohärenzzeiten zu realisieren, bietet das Anlegen longitudinaler Magnetfelder. Es ist daher von Interesse zu untersuchen, ob die erarbeiteten Methoden zur Berechnung der Zentralspindynamik in der Lage sind solche Magnetfelder zu berücksichtigen. Mathematisch äußert sich ein angelegtes Magnetfeld durch einen zusätzlichen Feldterm

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}_0 = \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{S}_0 - \boldsymbol{h} \times \boldsymbol{S}_0 \tag{5.1}$$

in der Bewegungsgleichung des Zentralspins, wobei h das Magnetfeld beschreibt. Die Badspins bleiben hier vom Feld unbeeinflusst. Legitimiert wird dieser Ansatz durch den extrem kleinen q-Faktor der Kernspins im Quantenpunkt, welcher dafür sorgt, dass die Kernspins kaum an das externe Magnetfeld koppeln. Die Modifikation in den Bewegungsgleichungen der approximativen Methoden verläuft analog. Abbildung 5.1 zeigt das Ergebnis der drei Methoden für eine Rechnung mit eingeschaltetem Magnetfeld der Stärke $|\mathbf{h}| = h$. Simuliert wurden jeweils N = 1000 Spins mit exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ und einer Magnetfeldstärke $h = 5 J_q$. Das Magnetfeld zeigt hier in z-Richtung während die Spinausrichtung zu Beginn wie bisher gaußverteilt gewählt wurde. Das typische Verhalten des Zentralspins, welches sich durch eine rasch abfallende Larmor-Präzession in der x- und y-Komponente ausdrückt, ist sichtbar. Wie bei einem vergleichsweise schwachen Magnetfeld in z-Richtung zu erwarten, bleibt die z-Komponente nahezu konstant. Offensichtlich liefern alle drei Verfahren exakt das selbe Ergebnis, was zeigt, dass auch das Einschalten eines transversalen Magnetfeldes von den approximativen Methoden korrekt erfasst wird. Aufbauend auf dieser Erkenntnis sollen in diesem Kapitel die Effekte des wiederholten Pulsens zu festen Zeiten $t_{\text{Puls}} = i\Delta t$ mit i = 1, 2, ... des Zentralspins bei eingeschaltetem Magnetfeld untersucht werden. Solche Pulssequenzen werden im Experiment genutzt, um dem Vorgang der Dekohärenz des Zentralspins entgegenzuwirken. Die einzelnen Pulse sollen in dieser Simulation als ideal angenommen werden. Sie wirken also instantan auf den Zentralspin. Da die Pulse der im Experiment [26] häufig eingetzten Pikosekundenlaser und die Spindynamik im Quantenpunkt auf unterschiedlichen Zeitskalen stattfinden, ist diese Annahme gerechtfertigt.



Abbildung 5.1: Ergebnisse der drei Methoden für die Zentralspinkorrelationen mit eingeschaltetem transversalem Magnetfeld der Stärke $h = 5 J_q$.

Der Fokus wird auf zwei unterschiedliche Pulsarten gelegt.

Puls 1:
$$S_0^x(t = t_{\text{Puls}}) \rightarrow |S_0^x|$$
 (5.2)

äußert sich dadurch, dass die x-Komponente des Zentralspins zum Pulszeitpunkt in ihren Betrag übergeht. Er ähnelt damit den Spin-Echo [27] erzeugenden π -Pulsen, welche einen Effekt, analog zu einer Zeitumkehr der Dynamik bewirken. Diese Pulsart weist bei Betrachtung der Autokorrelation des Zentralspins jedoch ein unerwünschtes Verhalten auf. Die Komponenten des Zentralspins werden zu Beginn aus einer Gaußverteilung um den Mittelwert $\mu = 0$ gezogen. Nimmt man nun zu einem beliebigen Zeitpunkt t den Betrag einer Komponente, multipliziert diesen mit ihrem zufälligen Startwert und mittelt über viele Durchläufe, wie es bisher bei der Betrachtung der gemittelten Autokorrelation der Fall war, so werden sich die auftretenden positiven und negativen Werte gegenseitig exakt aufheben. Die Korrelation wird daher zum Pulszeitpunkt instantan auf null abfallen. Aus diesem Grund soll hier nicht die Autokorrelation $\langle S_0^x(t) S_0^x(0) \rangle$, sondern die gemittelte Spinfunktion $\langle S_0^x(t) \rangle$ betrachtet werden. Die Kurven steigen daher aufgrund der hier vorgenommenen Mittelung des Betrags einer mit $\sigma^2 = 1/4$ gaußverteilten Zufallsvariablen zum Pulszeitpunkt auf den Wert

$$\langle |S_0^x|\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} |x| e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}x \tag{5.3a}$$

$$=\frac{-2\sigma^2}{\sqrt{2\pi\sigma}}\left[e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\sigma^2}}\right]_0^\infty\tag{5.3b}$$

$$=\frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}}\tag{5.3c}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\approx 0.399\tag{5.3d}$$

an.

Puls 2:
$$\boldsymbol{S}_0(t = t_{\text{Puls}}) \rightarrow \begin{pmatrix} |\boldsymbol{S}_0| \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 (5.4)

dreht den Zentralspin mit seiner gesamten Länge in x-Richtung. Der Nachteil der durchgeführten klassischen Rechnung ist, wie schon in Abschnitt 2.2 erwähnt, dass die Spinlänge nicht quantenmechanisch korrekt behandelt wird, was sich nun bei der Untersuchung dieses Pulses äußert. Während die Kurven der Korrelation in Analogie zur Quantenmechanik in den bisherigen Rechnung stets bei $\langle S_0^z(0)S_0^z(0)\rangle = 0.25$ starteten, weist die Korrelationsfunktion aufgrund der aus einer Gaußverteilung mit $\sigma^2 = 1/4$ zufällig gewählten Komponenten nun durch die Drehung in x-Richtung zu Beginn den Wert

$$\langle \boldsymbol{S}_0^x(t)\boldsymbol{S}_0^x(0)\rangle = 3\sigma^2 = 0.75 \tag{5.5}$$

auf. Um trotzdem Konsistenz mit den bisherigen Ergebnissen zu bewahren sind die Werte in den betroffenen Fällen mit 1/3 skaliert.

Die in Abschnitt 5.1 erwähnte Larmor-Präzession soll in den folgenden Untersuchungen nicht im Zentrum der Betrachtung stehen. Damit die erzielten Ergebnisse besser zur Geltung kommen, soll nun die Einhüllende der Larmor-Präzession

$$S_{\rm env}(t) \coloneqq \sqrt{\langle S_0^x(t) S_0^x(0) \rangle^2 + \langle S_0^y(t) S_0^x(0) \rangle^2}$$
(5.6a)

bzw.
$$S'_{\text{env}}(t) \coloneqq \sqrt{\langle S_0^x(t) \rangle^2 + \langle S_0^y(t) \rangle^2}$$
 (5.6b)

eingeführt werden, welche den Spin aus den jeweiligen Raumrichtungen heraus projiziert.

5.2 Entstehen eines Kommensurabilitätssignals

Das Ziel dieses Abschnittes ist die Untersuchung des Effektes wiederholten Pulsens auf den Zentralspins bei eingeschaltetem Magnetfeld der Stärke $h = 10 J_q$ in z-Richtung. Es werden ausschließlich die exponentiellen Kopplungen für $N = \infty$ Badspins berücksichtigt und in den Rechnungen wird die Lanczos-Methode verwendet. Das Pulsen erfolgt jeweils im Abstand $\Delta t = t_{\text{puls}} = 10 J_q^{-1}$ mit den im vorherigen Abschnitt eingeführten Pulsarten. Es wird erwartet, dass nach längerer Zeit des Pulsens eine Art Kommensurabilitätssignal entsteht [28]. Das ständige wiederholte Pulsen des Zentralspins wird sich hierbei nach einiger Zeit auch auf

das angekoppelte Overhauserfeld auswirken, wodurch bestimmte Moden im Overhauserfeld verstärkt auftreten (engl.: Mode-Locking). Beobachtbar ist dann ein Wiederanstieg der Zentralspinkorrelation schon vor dem eigentlichen Puls, verursacht durch das indirekt mitgepulste Overhauserfeld. Dieser Wiederanstieg der Korrelation beziehungsweise der Spinfunktion soll näher untersucht werden.

Abbildung 5.2 zeigt die Einhüllendenfunktion $S'_{env}(t)$ des Zentralspins in Abhängigkeit von der Zeit bei wiederholtem Pulsen mit Puls 1 nach Gleichung (5.2).



Abbildung 5.2: Einhüllende Spinfunktion $S'_{env}(t)$ bei wiederholtem Pulsen mit Puls 1 mit $t_{Puls} = 10 J_q^{-1}$ und eingeschaltetem Magnetfeld der Stärke $h = 10 J_q$. Die Badspins koppeln über die exponentiell verteilten Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ an den Zentralspin.

Erwartungsgemäß verschwindet $S'_{env}(t)$ zu Beginn der Simulation, weil sich die gaußverteilten Spinkomponenten aufgrund der Mittelung zu null addieren. Der erste Puls lässt die Funktion auf den im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Wert $S'_{env}(t_{Puls}) = 0.399$ ansteigen und anschließend wieder bis auf null abfallen. Auch nach dem zweiten Puls fällt die Funktion wieder bis auf null ab, wobei es danach schon zu einem deutlichen Wiederanstieg vor dem dritten Puls kommt. Die Spinfunktion wächst hier bis auf $S'_{env}(t) \approx 0.2$ an, was bereits 50 % der vollen Amplitude zum Pulszeitpunkt entspricht. Es ist also ein sehr starkes Kommensurabilitätssignal sichtbar. Der Wert der Kommensurabilitätssignalamplitude wächst nun mit jedem Puls, wobei zusätzlich ein schwacher alternierender Effekt beobachtbar ist. Sowohl die Amplitude der Spinfunktion zum Pulszeitpunkt, als auch die Kommensurabilitätssignalamplitude sind abwechselnd größer und beim folgenden Puls wieder kleiner. Außerdem wird der Wert $S'_{\rm env}(t_{\rm Puls}) = 0.399$ lediglich bei den ersten drei Pulsen erreicht. Anschließend fällt die Amplitude über den Zeitraum mehrerer Pulse stetig ab. Für eine detaillierte Analyse ist in Abbildung 5.3 das Kommensurabilitätssignal als Amplitude der Spinfunktion unmittelbar vor Eintreten des Pulses in Abhängigkeit der Anzahl Pulse dargestellt.



Abbildung 5.3: Signalamplitude von $S'_{env}(t_{Puls})$ unmittelbar vor Wirken des Pulses 1 der Form (5.2) in Abhängigkeit der Anzahl Pulse.

Es ist zunächst ein extrem steiler Anstieg der beobachteten Kommensurabilitätssignalamplitude zu sehen. Diese erreicht nach ungefähr 170 Pulsen ihr Maximum von etwa 0.35, um anschließend leicht abzufallen. Der gezeigte Inset verdeutlicht erneut den oben beschriebenen alternierenden Effekt. Die hier untersuchte Pulsart ist eher theoretischer Natur und sollte zunächst als eine Art Test dienen.

Die Effekte von Puls 2 sollen nun ein wenig ausfürlicher diskutiert werden. Abbildung 5.4 zeigt die einhüllende Spinkorrelationsfunktion $S_{env}(t)$ bei wiederholtem Pulsen der Form (5.4), wobei der Zentralspin bereits zum Zeitpunkt t = 0 polarisiert wird. Dargestellt ist hier die Autokorrelation, welche mit jedem Puls bei $S_{env}(t_{Puls}) = 0.25$ startet und zu Beginn zunächst rasch auf null abfällt. Nach zirka 7-8 Pulsen ist ein erster leichter Wiederanstieg der Spinfunktion vor dem eigentlichen Puls erkennbar, wobei diese Kommensurabilitätssignal-amplitude von da an kontinuierlich ansteigt. Schon hier wird deutlich, dass der auftretende Mode-Locking-Effekt in diesem Fall deutlich schwächer ist als bei der Pulsart zuvor. Insgesamt wirkt der Verlauf von $S_{env}(t)$ aber gleichmäßiger. Es kommt weder zu dem vorher beobachteten alternierenden Effekt, noch zu einem Abfall der Pulsamplitude.



Abbildung 5.4: Einhüllende Spinfunktion $S_{\text{env}}(t)$ bei wiederholtem Pulsen mit Puls 2 mit $t_{\text{Puls}} = 10 J_q^{-1}$ und eingeschaltetem Magnetfeld der Stärke $h = 10 J_q$. Die Badspins koppeln über die exponentiell verteilten Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ an den Zentralspin.

Um die Geschwindigkeit des Anstiegs der Kommensurabilitätssignalamplitude zu untersuchen, ist diese in Abbildung 5.5 in Abhängigkeit der Anzahl Pulse dargestellt. Der Anstieg der Amplitude ist hier zu Beginn erkennbar langsamer als bei der vorherigen Pulsart. Außerdem hat die Kurve kein Maximum sondern geht langsam in eine Art Sättigung über.



Abbildung 5.5: Kommensurabilitätssignalamplitude von $S_{env}(t_{Puls})$ in Abhängigkeit der Anzahl Pulse der Form (5.6a).

Eine interessante Frage ist nun, ob sich die Geschwindigkeit des Anstiegs der Kommensurabilitätssignalamplitude weitergehend quantitativ beschreiben und sich eventuell ein Zusammenhang zur verwendeten Kopplungsverteilung finden lässt. Hierzu ist es möglich den Anstieg des Signals für verschiedene γ -Parameter in den exponentiellen Kopplungen zu betrachten. Abbildung 5.6 zeigt diesen Anstieg für Kopplungsparameter im Bereich $\gamma = 10^{-1}$ bis $\gamma = 10^{-5}$. Offenbar ist der Anstieg des Signals umso langsamer, je kleiner der γ -Parameter im System ist. Das Overhauserfeld reagiert für kleine γ scheinbar träger auf das Pulsen und der Verstärkungseffekt auf den Zentralspin tritt mit größerer Verzögerung ein. Ein qualitativer Zusammenhang zwischen Kopplungsverteilung und Geschwindigkeit des Signalanstiegs ist damit aufgezeigt.

Für eine tiefergehende Analyse sind in Abbildung 5.7 die selben Kurven dargestellt wie zuvor, aber nun mit skalierter Zeitachse. Aufgrund der durch die Skalierung sehr zeitaufwendigen Rechnung, sind die Kurven für die beiden kleinsten γ -Parameter lediglich im Anfangsbereich der Abbildung dargestellt (siehe Inset). Wie schon in Abschnitt 4.1 wurde die Zeitachse mit $1/\sqrt{\gamma}$ skaliert, was dazu führt, dass die zuvor sehr unterschiedlich verlaufenden Kurven der Signalamplituden nun in guter Näherung übereinander liegen. Dies ähnelt dem Dephasierungsverhalten des Zentralspins für lange Zeiten, wo ebenfalls ein solches Skalenverhalten mit der Wurzel des Kopplungsparameters aufgezeigt werden konnte. Damit ist nun eine quantitativ beschreibbare Abhängigkeit der Kommensurabilitätssignalamplitude von der Art der Kopplungen im System dargelegt.



Abbildung 5.6: Signalamplitude von $S_{\text{env}}(t_{\text{Puls}})$ unmittelbar vor dem Wirken von Puls 2 in Abhängigkeit der Anzahl Pulse für verschiedene γ -Parameter in den exponentiellen Kopplungen.



Abbildung 5.7: Signalamplitude von $S_{\text{env}}(t_{\text{Puls}})$ unmittelbar vor dem Wirken von Puls 2 in Abhängigkeit der Anzahl Pulse für verschiedene γ -Parameter in den exponentiellen Kopplungen mit skalierter Zeitachse.

5.3 Entwicklung der Verteilung des Overhauserfeldes

In diesem Abschnitt steht das Overhauserfeld B im Zentrum der Betrachtung. Untersucht wird dessen Verteilung in Abhängigkeit der Zeit bei gepulstem Zentralspin in der Lanczos-Methode. Zu Beginn ist B gaußverteilt, was sich aber aufgrund der Kopplung des Feldes an den gepulsten Zentralspin nach einer gewissen Anzahl n_{Puls} an Pulsen ändern sollte. Der Zentralspin, welcher auch hier über die exponentiellen Kopplungen mit $\gamma = 0.01$ an die Badspins koppeln soll, wird zunächst nach jeweils $\Delta t = t_{\text{Puls}} = 10 J_q^{-1}$ durch Anwendung von Puls 2 gemäß Schema (5.4) polarisiert. Simultan wird ein Magnetfeld h in z-Richtung angelegt. Anschließend wird die Verteilung der z-Komponente B^z des Overhauserfeldes nach einer ausreichend großen Zahl an Pulsen untersucht. Im Detail werden wie zum Zwecke der Mittelung in allen bisherigen Simulationen auch hier wieder 10⁶ Durchläufe gerechnet, wobei das Overhauserfeld in jedem einzelnen Durchlauf vor jedem Puls gemäß seines jeweiligen Wertes in die zugehörige Klasse eines Histogrammes eingeteilt wird. Berücksichtigt werden nur Werte im Bereich $B^z \in [-2,2]$ bei einer Breite $\Delta = 0.01$ der 401 Histogrammlassen. In den Abbildungen 5.8 bis 5.11 ist der zeitliche Verlauf der Verteilung von B^z in den resultierenden Histogrammen dargestellt.



Abbildung 5.8: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode zu Beginn der Simulation. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 10 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 10 J_q^{-1}$.



Abbildung 5.9: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode nach $n_{\text{Puls}} = 50$ Pulsen. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 10 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 10 J_q^{-1}$.



Abbildung 5.10: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode nach $n_{\text{Puls}} = 200$ Pulsen. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 10 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 10 J_q^{-1}$.



Abbildung 5.11: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode nach $n_{\text{Puls}} = 1000$ Pulsen. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 10 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 10 J_q^{-1}$.

Das erste Bild zeigt die anfängliche Verteilung von B^z zu Beginn der Simulation, die wie erwartet der Form einer Gaußverteilung entspricht. Nach $n_{\text{Puls}} = 50$ Pulsen haben sich bereits sechs deutlich sichtbare Spitzen im Histogramm herausgebildet. Auffällig ist außerdem das Entstehen von kleineren Maxima, zwischen den primären Spitzen, welche im weiteren zeitlichen Verlauf wieder verschwinden. Bereits nach $n_{\text{Puls}} = 200$ Pulsen sind diese Zwischenmaxima deutlich kleiner geworden, während die eigentlichen Spitzen weiter an Höhe gewinnen. Zu Simulationsende bei $n_{\text{Puls}} = 1000$ ist das Histogramm quasi auskonvergiert. Es haben sich im betrachteten Wertebereich insgesamt sechs achsensymmetrisch um $B^z = 0$ verteilte Spitzen gebildet. Die Bereiche zwischen den Spitzen wurden vom Overhauserfeld nahezu vollständig vermieden.

Aufgrund der durch das Pulsen des Zentralspins vorgegebenen Mode, sollte ein direkter Zusammenhang zwischen dem Abstand δ zweier benachbarter Spitzen und dem zeitlichen Abstand Δt zweier Pulse bestehen. Der Zentralspin präzediert allgemein mit einer Larmorfrequenz

$$\omega_{\rm L} = h_{\rm eff} = h + B^z \tag{5.7}$$

um ein effektives Feld h_{eff} , welches sich zusammensetzt aus dem externen Magnetfeld h in z-Richtung und der z-Komponente des Overhauserfeldes B^z . Durch das wiederholte Pulsen wird dem Zentralspin jedoch aktiv eine Präzessionsfrequenz aufgezwungen. Um dies zu ermöglichen, muss das effektive Feld in (5.7) sich der von außen vorgegebenen Pulsfrequenz anpassen. Das wiederum sorgt für einen Übertrag dieser Pulsmode an das an den Zentralspin koppelnde Overhauserfeld, da das externe Magnetfeld h fest ist und sich weder in seiner Richtung noch in seinem Betrag ändern kann. Das bedeutet, es müssen sich im Laufe der Simulation Wertebereiche herausbilden, in welchen sich das Overhauserfeld häufiger befindet, als in anderen, wobei diese Wertebereiche vom Pulsabstand abhängig sein sollten. Das Overhauserfeld rastet in der vorgegeben Pulsmode ein (Mode-Locking). Dies verursacht die Spitzen, die in den Histogrammen sichtbar sind und ist zugleich der Grund für das in Abschnitt 5.2 beobachtete Kommensurabilitätssignal. Für die Abstände ΔB^z zweier benachbarter Spitzen sollte aus den genannten Gründen die Beziehung

$$\Delta B = \frac{2\pi}{\Delta t} \tag{5.8}$$

gelten. Sie sollten der Pulsfrequenz $\omega_{\text{Puls}} = 2\pi/\Delta t$ entsprechen. Um diese Theorie zu verifizieren, zeigt Abbildung 5.12 die Verteilung des Overhauserfeldes nach 1000 Pulsen zusätzlich für einen weiteren Pulsabstand $\Delta t = 15$. Da dies einer kleineren Pulsfrequenz ω_{Puls} entspricht, sollten die Spitzen im Histogramm nun näher beieinander liegen und infolgedessen insgesamt mehr Spitzen zu sehen sein. Dies ist offensichtlich auch der Fall. Es sind nun acht statt der vorherigen sechs Spitzen sichtbar.



Abbildung 5.12: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode nach $n_{\text{Puls}} = 1000$ Pulsen. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 10 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 15 J_q^{-1}$.

Für eine quantitative Auswertung der Histogramme ist es nun möglich die Abstände $\delta_{\Delta t}$ zweier benachbarter Spitzen für den Pulsabstand Δt zu identifizieren und mit den theoretischen Werten

0

$$\delta_{10} = \frac{2\pi}{10} \approx 0.63 \tag{5.9a}$$

$$\delta_{15} = \frac{2\pi}{15} \approx 0.41 \tag{5.9b}$$

zu vergleichen. Dies ist in Tabelle 5.3 inklusive der relativen Abweichung vom erwarteten Wert dargestellt. Die Abstände wurden bestimmt als Differenz der B^z -Werte der Histogrammklassen, an denen jeweils das Maximum an Treffern in der einzelnen Spitze gezählt wurde.

Spitzen	δ_{10}	$\operatorname{Abweichung}\left[\%\right]$	δ_{15}	$\operatorname{Abweichung}[\%]$
1-2	0.60	4.5	0.41	0.0
2-3	0.61	2.9	0.41	0.0
3-4	0.60	4.5	0.41	0.0
4-5	0.61	2.9	0.41	0.0
5-6	0.62	1.3	0.41	0.0
6-7	-	-	0.42	2.4
7-8	-	-	0.44	7.3

Tabelle 5.1: Tabellarische Darstellung der Abstände $\delta_{\Delta t}$ der für $\Delta t = 15 J_q^{-1}$ und $\Delta t = 10 J_q^{-1}$ in der histogrammartigen Darstellung der Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes entstehenden Spitzen inklusive deren relativer Abweichung vom Theoriewert.

Die auftretenden Abweichungen von den Theoriewerten lassen sich durch die endliche Breite der einzelnen Histogrammklassen erklären, mit der die B^z -Achse diskretisiert wurde. Da aber die relativen Abweichungen alle sehr gering bleiben und insbesondere für $\Delta t = 15J_q^{-1}$ zumeist sogar verschwinden, scheinen die Untersuchungen die theoretischen Überlegungen zu bestätigen.

Die Abstände der Spitzen lassen sich nun beschreiben, jedoch nicht ihre absoluten Positionen. Eine erste Vermutung, dass der Zentralspin mit

$$\omega_L = m \cdot \omega_{\text{Puls}} , \quad m \in \mathbb{N}$$
(5.10)

ein ganzzahliges Vielfaches der Pulsfrequenz annimmt, ließ sich nicht bestätigen. Mit dieser Annahme lässt sich die Lage der Spitzen in den Histogrammen nicht beschreiben. Daher soll nun eine detaillierte Untersuchung der Zentralspintrajektorie im Bereich um einen einzelnen Puls folgen. Statt der bisher betrachteten Einhüllendenfunktion S_{env} soll nun wieder die Autokorrelation $\langle S_0^u(t) S_0^u(0) \rangle$ einer einzelnen Spinkomponente beobachtet werden, wodurch die Larmor-Präzession des Zentralspins sichtbar wird. Würde die ursprüngliche Annahme zutreffen, dass der Zentralspin zwischen zwei Pulsen eine ganze Anzahl an Präzessionen durchführt, so sollten die Schwingungen vor und nach dem Puls in Phase sein. Abbildung 5.13 zeigt, dass dies nicht der Fall ist. Kurz vor Wirken des Pulses bei $t = 990 J_q^{-1}$ ist der Zentralspin gerade mit seiner vollen Länge in negative x-Richtung gedreht, um dann durch den Puls wieder vollständig in positive x-Richtung umgeklappt zu werden. Das bedeutet der Spin führt nicht, wie zunächst vermutet, eine ganze Zahl an Präzessionen zwischen zwei Pulsen durch, sondern er präzediert mit einem halbzahligen Vielfachen der Pulsfrequenz. Um diese These zu bestätigen sind in Abbildung 5.13 zusätzlich Kosinusfunktionen mit variabler linearer Amplitude der Form

$$A(t+t_0) \cdot \cos(\omega(t+t_0) + \phi) + c$$
(5.11)

jeweils links und rechts vom Puls an die Daten gefittet.



Abbildung 5.13: Zentralspintrajektorie in der Umgebung eines Pulses für die Parameter $h = 10 J_q$ und $\Delta t = 10 J_q^{-1}$. Eine nichtlineare Augleichsrechnung der Form (5.11), jeweils für die Daten vor und nach dem Puls, ist ebenfalls dargestellt.

Aus den Parametern lässt sich nun nach $\varphi = \omega t_0 + \phi$ die Phase der jeweiligen Schwingung berechnen, um damit anschließend die Phasendifferenz $\Delta \varphi = |\varphi_{\text{links}} - \varphi_{\text{rechts}}|$ zwischen der Präzession vor und der Präzession nach dem Puls zu bestimmen. Aus der nicht linearen Ausgleichrechnung ergibt sich ein Wert von

$$\Delta \varphi \approx 19.03 \,\pi \,, \tag{5.12}$$

was aufgrund der Periodizität der Funktion in (5.11) einer Phase von $\varphi = 0.97 \pi \approx \pi$ entspricht. Dies bestätigt die Annahme einer halbzahligen Anzahl von Schwingungen des Zentralspins zwischen zwei Pulsen. Die absolute Lage der Spitzen in den Histogrammen sollte sich demnach durch

$$B_m^z = \left(m + \frac{1}{2}\right)\frac{2\pi}{\Delta t} - h , \quad m \in \mathbb{N}$$
(5.13a)

beschreiben lassen. Eine Verifikation dieses Zusammenhangs ist nun durch Bestimmung der verschiedenen B_m^z als Positionen der einzelnen Spitzen im Histogramm möglich, um zu prüfen, ob diese auf ein ganzzahliges m führen. Zudem sollte eine Änderung des angelegten Magnetfeldes zu einer Verschiebung der Spitzen führen, was in Abbildung 5.14 deutlich wird.



Abbildung 5.14: Verteilung der z-Komponente des Overhauserfeldes in der Lanczos-Methode nach $n_{\text{Puls}} = 1000$ Pulsen. Die Stärke des in z-Richtung angelegten Magnetfeldes beträgt $h = 24 J_q$ und der Pulsabstand ist $\Delta t = 10 J_q^{-1}$.

Hier wurde der Pulsabstand von $\Delta t = 10 J_q^{-1}$ beibehalten und das Magnetfeld zu $h = 24 J_q$ gewählt. Es tritt eine signifikante Verschiebung der Spitzen in B^z -Richtung auf. Tabelle 5.3 zeigt eine Auflistung der Positionen B^z der Spitzen für die Konfigurationen mit $\Delta t = 10 J_q^{-1}$ und $h = 10 J_q$ und die daraus resultierenden Werte für m. Die Positionen der Maxima B_m^z wurden, wie zuvor, anhand der maximal gezählten Treffer einer Spitze bestimmt.

Spitzen	$B^{z}\left[J_{q}\right]$	m
1	-1.50	13.0
2	-0.76	14.2
3	-0.29	15.0
4	-0.31	15.9
5	0.92	16.9
6	1.54	17.9

Tabelle 5.2: Tabellarische Darstellung der Positionen der Spitzen im Histogramm von B^z für $\Delta t = 10 J_q^{-1}$ und $h = 10 J_q$ und die daraus resultierenden Werte für m.

Dass die Werte für m nicht exakt ganzzahlig sein würden, war aufgrund der vielen Fehlerquellen in der Analyse zu erwarten. Vor allem die Bestimmung der Peakpositionen ist hier nur grob möglich. Im Rahmen der Fehler der Untersuchung scheint die Annahme einer Bestätigung der vorhergesagten ganzzahligen m aber gerechtfertigt. Es sollten hier jedoch zukünftig noch weitere Rechnungen durchgeführt werden, insbesondere für verschiedene Magnetfelder, um die Theorie abschließend bestätigen zu können. Mit der Erkenntnis, dass die entstehenden Moden

im Overhauserfeld halbzahligen Präzessionen des Zentralspins zwischen zwei Pulsen entsprechen, lassen sich nun auch die kurzzeitig sichtbaren Zwischenmaxima in den Histogrammen erklären. Hierbei handelt es sich höchstwahrscheinlich um die Mode, welche einer ganzen Zahl an Präzessionen entspricht. Diese Mode scheint jedoch durch einen bisher unbekannten Mechanismus unterdrückt zu sein, wodurch die auftretenden Zwischenmaxima rasch wieder verschwinden. Auch diesbezüglich sollten noch weitere Nachforschungen angestellt werden. Möglicherweise hängt es von der Pulsart ab, welche der beiden Moden schlussendlich verstärkt wird.

In diesem Kapitel konnte gezeigt werden, dass selbst in dem untersuchten relativ einfachen klassischen Modell das Entstehen eines Kommensurabilitätssignals durch regelmäßiges Pulsen des Zentralspins mit einer durch den Pulsabstand vorgegebenen Mode durch einen Mode-Locking-Effekt des Overhauserfeldes unter Verwendung der Lanczos-Methode erfasst werden kann. Es konnte ein direkter Zusammenhang zwischen sich einstellenden Werten des Overhauserfeldes und dem zeitlichen Abstand der Pulse hergestellt werden.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Herleitung und Präsentation verschiedener Algorithmen zur effizienten Berechnung von Autokorrelationsfunktionen $\langle S_0^z(t) S_0^z(t) \rangle$ im klassischen Zentralspinmodell. Die Spinerwartungswerte berechnen sich hier als Ensemblemittelwerte der Zentralspintrajektorien. Um das rechentechnische Problem der zeitaufwändigen Lösung aller Bewegungsgleichungen der N + 1 Spins im Modell zu umgehen, wird zunächst die Hierarchie-Methode vorgestellt, deren Vorteil es ist, die Dynamik des Overhauserfeldes in einer leicht zu trunkierenden Hierarchie von Bewegungsgleichungen zu simulieren, anstatt die zeitliche Entwicklung jedes Badspins einzeln zu berechnen. Die Methode ist allerdings nur für kleine Simulationszeiten hinreichend genau, weshalb im nächsten Schritt eine Verbesserung dieser Methode unter der Verwendung des Lanczos-Algorithmus gezeigt wird. Die Idee ist es hier das Overhauserfeld in orthonormalen Polynomen zu beschreiben, was die Genauigkeit der Simulation deutlich steigert. Vergleichswerte liefert jeweils die numerische Lösung des gesamten Differenzialgleichungssystems aller Badspins. Eine besondere Eigenschaft dieser Methode ist, dass sogar die Möglichkeit besteht unendlich große Bäder zu simulieren.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird gezeigt, dass sich für das betrachtete System eine spektrale Dichte finden lässt, die sich in guter Näherung polynomiell beschreiben lässt. Aufbauend auf diesen Beobachtungen wird die Spektraldichte-Methode vorgestellt, in der sich die zeitliche Entwicklung des Overhauserfeldes durch beliebige Diskretisierung in der Spektraldichte bestimmen lässt. Es zeigt sich, dass hier eine exponentielle Diskretisierung von Vorteil ist, da dort mehr Gewicht auf die kleinen Frequenzen gelegt wird. Die kleinen Frequenzen dominieren insbesondere das Langzeitverhalten des Zentralspins, weshalb eine höhere Gewichtung dieser zu genaueren Ergebnissen der Zentralspintrajektorie für große Zeiten führt. Die Resultate der Methode sind vielversprechend, wobei möglicherweise noch Potential für Verbesserung im Verfahren der Diskretisierung in der Spektraldichte vorhanden ist. Eine möglichst exakte Simulation des Langzeitverhaltens ist wichtig, um zum Beispiel größere Pulssequenzen beschreiben zu können. Deutlich wird dies in Abschnitt 5.2 bei der Untersuchung des auftretenden Kommensurabilitätssignals. Um diesen Effekt sichtbar zu machen und sinnvoll beschreiben zu können, muss hier bis zu sehr großen Zeiten $t \ge 10\,000\,J_a^{-1}$ simuliert werden, wobei selbst das noch nicht ausreicht, um den Effekt der Skalierung der Signalamplitude mit dem Kopplungsparameter zufriedenstellend beschreiben und darstellen zu können (siehe Abbildung 5.7). Weiterhin wäre es sinnvoll zu untersuchen, ob die Algorithmen ebenfalls einer semiklassischen Beschreibung standhalten, in welcher das Bad klassisch, der Zentralspin hingegen quantenmechanisch behandelt wird.

Nachdem nun die benötigten effizienten Algorithmen zur Verfügung stehen, werden unter deren Verwendung weitere Untersuchungen am klassischen Zentralspinmodell durchgeführt. Zunächst steht die Analyse des Langzeitverhaltens des Zentralspins unter Verwendung exponentieller Kopplungen im Mittelpunkt. Hier zeigt sich, dass der Abfall der Korrelation im Langzeitlimes logarithmisch erfolgt. Vorangegangene Forschungen auf diesem Gebiet [11, 24] konnten somit bestätigt werden. Zusätzlich kann für die Autokorrelation des Zentralspins ein zeitliches Skalierungsverhalten dargelegt werden, welches die Existenz einer zweiten Energieskala impliziert, die für kleine Kopplungsparameter von der durch J_q definierten Energieskala separiert. Dieses Skalierungsverhalten wird für eine exponentielle und eine lineare Kopplungsverteilung nachgewiesen.

Abschließend wird im letzten Teil der Arbeit das Pulsen des Zentralspins bei Anliegen eines

transversalen Magnetfeldes unter Verwendung des Lanczos-Algorithmus untersucht. Es zeigt sich, dass sich einige im Experiment beobachtbare Phänomene durch Simulation mit den eingeführten Methoden erfassen lassen. Ein im zeitlichen Verlauf anwachsendes Kommensurabilitätssignal, welches auf eine Einrastung der durch das Pulsen des Zentalspins dem angekoppelten Overhauserfeld aufgezwängten Mode hindeutet, kann für unterschiedliche Pulsarten beobachtet werden. Weiterführende Untersuchungen deuten zudem auf ein zeitliches Skalierungsverhalten dieser Kommensurabilitätssignalamplitude mit der Wurzel des Kopplungsparameters in den exponentiellen Kopplungen hin, ähnlich der zuvor gezeigten Skalierung des Langzeitverhaltens. Für fundiertere Aussagen bezüglich dieser Skalierung könnten hier zukünftig Rechnungen für noch größere Zeiten durchgeführt werden, um zu gewährleisten, dass nach der zeitlichen Skalierung in Abbildung 5.7 alle Kurven für die verschiedenen γ gleich weit in der Zeit gehen.

Es folgt eine Analyse der zeitlichen Entwicklung der Verteilung des Overhauserfeldes B mit der Lanczos-Methode. Auch hier ist die Einrastung der Pulsmode beobachtbar. Im zu Beginn der Simulation gaußverteilten Overhauserfeld bilden sich im Laufe der Zeit in einem Histogramm sichtbar zu machende Spitzen, deren Abstände und Positionen direkt mit dem zeitlichen Abstand Δt zweier Pulse korrespondieren. Weiterhin konnte aufgezeigt werden, dass der Zentralspin im gepulsten System nicht, wie zunächst vermutet, eine ganze, sondern eine halbe Zahl an Präzessionen vollzieht.

Mit den nun zur Verfügung stehenden universell einsetzbaren Algorithmen bieten sich zukunftsbezogen weitere Forschungen im Bereich des Langzeitverhaltens im Zentralspinmodell an. Sicherlich wäre es, wie schon erwähnt, sinnvoll die Algorithmen auf semiklassische Beschreibungen des Modells anzuwenden und die hier erzielten Resultate mit der rein klassischen Rechnung zu vergleichen. Auch weitere Untersuchungen des klassischen Modells bezüglich alternativer Pulsformen und in Bezug auf die Moden in der Verteilung des Overhauserfeldes sind angebracht. Außerdem bietet sich ein Vergleich der durch Simulation erzielten Resultate mit aus Experimenten gewonnenen Messwerten an.
Quellenverzeichnis

- G. E. MOORE. Cramming more components onto integrated circuits. Electronics 38, 8 (1965).
- [2] M. A. NIELSEN, I. L. CHUANG. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press (2000).
- [3] P. W. SHOR. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. SIAM Journal on Scientific Computing (1997).
- [4] L. K. GROVER. A fast quantum mechanical algorithm for database search. Proceedings of the Academy of Natural Sciences of Philadelphia (1996).
- [5] R. HANSON, L. KOUWENHOVEN, J. PETTA, S. TARUCHA, L. VANDERSYPEN. *Spins* in few-electron quantum dots. Reviews of Modern Physics (2006).
- [6] 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, R1809 (2003).
- [7] A. GREILICH, S. E. ECONOMOU, S. SPATZEK, D. R. YAKOVLEV, D. REUTER, A. D. WIECK, T. L. REINECKE, M. BAYER. Ultrafast optical rotations of electron spins in quantum dots. Nat. Phys. 5, 262 (2009).
- [8] A. V. KHAETSKII, Y. V. NAZAROV. Spin relaxation in semiconductor quantum dots. Phys. Rev. B 61, 12639 (2000).
- [9] A. V. KHAETSKII, Y. V. NAZAROV. Spin-flip transitions between Zeeman sublevels in semiconductor quantum dots. Phys. Rev. B 64, 125316 (2001).
- [10] I. A. MERKULOV, A. L. EFROS, M. ROSEN. Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots. Phys. Rev. B 65, 205309 (2002).
- [11] G. CHEN, D. L. BERGMAN, L. BALENTS. Semiclassical dynamics and long-time asymptotics of the central-spin problem in a quantum dot. Phys. Rev. B 76, 045312 (2007).
- [12] S. I. ERLINGSSON, Y. V. NAZAROV. Evolution of localized electron spin in a nuclear spin environment. Phys. Rev. B 70, 205327 (2004).
- [13] D. STANEK. Dynamics and Decoherence in the Central Spin Model. Dissertation, Technische Universität Dortmund (2013).
- [14] M. GAUDIN. Diagonalisation d'une classe d'hamiltoniens de spin. J. Phys. France 37 (1976).
- [15] M. GAUDIN. La fonction d'onde de Bethe. Masson (1983).
- [16] D. STANEK, C. RAAS, G. S. UHRIG. Dynamics and decoherence in the central spin model in the low-field limit. Phys. Rev. B 88, 155305 (2013).

- [17] A. FARIBAULT, D. SCHURICHT. Integrability-Based Analysis of the Hyperfine-Interaction-Induced Decoherence in Quantum Dots. Phys. Rev. Lett. 110, 040405 (2013).
- [18] B. P. WELFORD. Note on a Method for Calculating Corrected Sums of Squares and Products. Technometrics 4, 3, 419 (1962).
- [19] N. JAESCHKE. Induzierte Kernspinpolarisation in Quantenpunkten. Diplomarbeit, Technische Universität Dortmund (2015).
- [20] C. LANCZOS. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. Journal of Research of the National Bureau of Standards 45, 4 (1950).
- [21] D. G. PETTIFOR. The recursion method and its applications. Springer (1985).
- [22] W. NOLTING. Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie. Springer.
- [23] M. ABRAMOWITZ, I. STEGUN. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. National Bureau of Standards (1964).
- [24] U. SEIFERT, P. BLEICKER, P. SCHERING, A. FARIBAULT, G. S. UHRIG. Persisting correlations of a central spin coupled to large spin baths. Phys. Rev. B 94, 094308 (2016).
- [25] S. KNÜTTEL. Dauerkorrelationen im klassischen Zentralspinmodell (2016). Bachelorarbeit.
- [26] J. BEREZOVSKY, M. H. MIKKELSEN, N. G. STOLTZ, L. A. COLDREN, D. D. AW-SCHALOM. Picosecond Coherent Optical Manipulation of a Single Electron Spin in a Quantum Dot. Science 320, 349 (2008).
- [27] E. L. HAHN. Spin Echoes. Phys. Rev. 80, 580 (1950).
- [28] S. VARWIG, A. GREILICH, D. R. YAKOVLEV, M. BAYER. Spin mode locking in quantum dots revisited. physica status solidi (b) 251, 9, 1892 (2014).

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. Götz Uhrig für die hervorragende Betreuung dieser Arbeit bedanken. Außerdem danke ich Benedikt Fauseweh, der ebenfalls einen Teil der Betreuung übernommen hat und jederzeit für Fragen zur Verfügung stand. Mein Dank gilt außerdem Prof. Dr. Frithjof Anders für die Übernahme der Zweitkorrektur sowie ihm und Dr. Wouter Beugeling für die bereichernden Diskussionen. Meinen Bürokollegen Dominik Ixert, David Schneider und Leanna Splinter danke ich für ihre Hilfe bei der Lösung technischer Probleme und für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Zuletzt möchte ich mich besonders bei meinen Eltern für die Jahre der Unterstützung während meiner Schul- und Studienzeit bedanken.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Masterarbeit mit dem Titel "Effiziente Algorithmen zur Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im klassischen Zentralspinmodell mit unendlich vielen Badspins" selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 \in geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

Ort, Datum

Unterschrift