

# Quantenmechanische Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im Zentralspinmodell für unendlich große Spinbäder

Masterarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science

vorgelegt von  
Robin Röhrig  
geboren in Arnsberg

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund  
2017

1. Gutachter : Prof. Dr. Götz S. Uhrig

2. Gutachter : Prof. Dr. Frithjof B. Anders

Datum des Einreichens der Arbeit: 26. September 2017

## Kurzfassung

Das Zentrale Thema dieser Arbeit ist die quantenmechanische Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im thermodynamischen Limes mit iterierten Bewegungsgleichungen im Zentralspinmodell. Dieses Modell beschreibt die Dynamik eines zentralen Spins in einem Bad aus Kernspins, die besonders im Bezug auf die Realisierung von Qubits eine wichtige Rolle spielt. Die Schwierigkeit besteht darin, dass in realistischen Systemen eine sehr große Anzahl wechselwirkender Badspins vorhanden ist. Quantenmechanische Berechnungen, die annähernd realistische Badgrößen erfassen können, sind sehr limitiert in der berechenbaren Zeit. Mit einer klassischen Betrachtung ist es jedoch bereits gelungen, Autokorrelationen sogar für ein unendlich großes Spinbad zu berechnen und dabei trotzdem sehr lange Zeiten zu erreichen.

Aufbauend auf diesen effizienten klassischen Algorithmen wird eine quantenmechanische Operatorbasis hergeleitet, die ebenfalls eine Betrachtung im thermodynamischen Limes erlaubt und dabei die Berechnung längerer Zeiten ermöglicht, als etablierte Methoden für große Bäder. Die nötigen Anpassungen für den Übergang von der klassischen zur quantenmechanischen Beschreibung werden dabei motiviert und erläutert. Die Resultate werden anschließend mit etablierten Methoden verglichen, wobei sich eine sehr gute Übereinstimmung für kurze Zeiten zeigt. Ein Vergleich für längere Zeiten wird anschließend für kleine Bäder durchgeführt. Die Auswirkungen eines externen Magnetfeldes, welches auf den Zentralspin wirkt, werden abschließend analysiert.

## Abstract

The main topic of this thesis is the quantum mechanical calculation of autocorrelation functions in the thermodynamic limit using iterated equations of motion in the central spin model. This model describes the dynamics of a central spin surrounded by a bath of nuclear spins, which is especially relevant for the realization of qubits. The main difficulty is caused by the large number of interacting bath spins in a realistic system. Quantum mechanical approaches that can describe a relevant number of nuclear spins are restricted to very limited times. However, with a classical approach it is now possible to calculate autocorrelations for long times, even for infinite baths.

Using these efficient algorithms, a quantum mechanical operator basis will be derived that also allows a calculation for an infinite bath while reaching longer times than other methods for large spin baths. For this, the adjustments needed to achieve the transition from the classical to the quantum mechanical description are motivated and explained. Then, comparisons of the results with other methods are presented, which show a good agreement for small times. A comparison for longer times is made afterwards using small baths. Finally, the influence of a magnetic field, that acts on the central spin, is analyzed.

---

# Inhaltsverzeichnis

|                                                                  |           |
|------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>                                        | <b>IV</b> |
| <b>1 Einleitung</b>                                              | <b>1</b>  |
| <b>2 Zentralspinmodell</b>                                       | <b>3</b>  |
| <b>3 Iterierte Bewegungsgleichungen</b>                          | <b>7</b>  |
| <b>4 Direkte Basisentwicklung</b>                                | <b>11</b> |
| 4.1 Basisoperator . . . . .                                      | 11        |
| 4.2 Allgemeine Basis-Entwicklung und Trunkierung . . . . .       | 12        |
| 4.3 Resultate . . . . .                                          | 15        |
| 4.3.1 Exakte Lösung . . . . .                                    | 15        |
| 4.3.2 Trunkierte Lösung . . . . .                                | 18        |
| <b>5 Approximative Basisentwicklung für große Bäder</b>          | <b>21</b> |
| 5.1 Orthonormale Felder und Lanczos-Rekursion . . . . .          | 21        |
| 5.2 Basisoperatoren mit Hermitepolynomen . . . . .               | 23        |
| 5.3 Allgemeine Basisentwicklung . . . . .                        | 26        |
| 5.4 Übergang zu bosonischen Leiteroperatoren . . . . .           | 28        |
| 5.4.1 Leiteroperatoren der Hermitepolynome . . . . .             | 29        |
| 5.4.2 Zentralspin-Matrizen des Hamiltonoperators . . . . .       | 30        |
| 5.4.2.1 Multiplikation . . . . .                                 | 30        |
| 5.4.2.2 Kommutation . . . . .                                    | 31        |
| 5.4.3 Effektiver Hamiltonoperator . . . . .                      | 32        |
| 5.4.4 Konsistenz der Approximation . . . . .                     | 35        |
| 5.4.5 Trunkierungsschema . . . . .                               | 38        |
| 5.5 Resultate . . . . .                                          | 38        |
| 5.5.1 Eingefrorenes Overhauserfeld und Merkulov-Lösung . . . . . | 39        |
| 5.5.2 Dynamisches Overhauserfeld . . . . .                       | 41        |
| 5.5.2.1 Stufe $j = 1$ . . . . .                                  | 42        |
| 5.5.2.2 Stufe $j = 2$ . . . . .                                  | 45        |
| 5.5.2.3 Stufe $j = 3$ . . . . .                                  | 48        |
| 5.5.2.4 Simulation mit Magnetfeld . . . . .                      | 51        |

|          |                                                       |           |
|----------|-------------------------------------------------------|-----------|
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                   | <b>55</b> |
| <b>A</b> | <b>Approximative Basisentwicklung für große Bäder</b> | <b>59</b> |
| A.1      | Leiteroperatoren der Hermite-Polynome . . . . .       | 59        |
| A.2      | Direkte Zeitentwicklung . . . . .                     | 60        |
| A.2.1    | 0. Ordnung . . . . .                                  | 60        |
| A.2.2    | 1. und 2. Ordnung . . . . .                           | 60        |
| A.2.3    | 3. und 4. Ordnung . . . . .                           | 61        |
| A.2.4    | 6. Ordnung . . . . .                                  | 62        |
|          | <b>Quellenverzeichnis</b>                             | <b>65</b> |

# Kapitel 1

## Einleitung

Ein klassischer Computer arbeitet bekanntermaßen mit einem Binärsystem aus Bits, welche entweder den Wert Eins oder Null annehmen können. Ein vergleichbares Zwei-Niveau-System kann auch quantenmechanisch betrachtet werden und wird Quantenbit, oder kurz Qubit, genannt. Durch die Eigenschaften der Überlagerung und Verschränkung sind mit Qubits Algorithmen denkbar, die spezielle Aufgaben deutlich effizienter lösen als herkömmliche Computer.

Der Shor-Algorithmus [1, 2] ermöglicht zum Beispiel durch eine Primfaktorzerlegung in polynomialer Zeit kryptographische Verschlüsselungen zu dechiffrieren, die mit heutigen Computern wegen der schlechten Laufzeit als praktisch nicht dechiffrierbar gelten. Ein weiteres Beispiel ist der Grover-Algorithmus, welcher die Suche in einer großen Datenbank von einer linearen Laufzeit auf eine Laufzeit proportional zur Quadratwurzel der Datenbankeinträge reduziert [3].

Damit ein physikalisches System für einen Qubit in Frage kommt, muss es die bekannten DiVincenzo-Kriterien erfüllen [4]. Es gibt viele Ansätze, jedoch erfüllt bisher kein Kandidat alle dieser Kriterien. Ein vielversprechendes System ist ein lokalisiertes Elektron eingeschlossen in einem Quantenpunkt, wobei durch den Elektronenspin mit den Zuständen  $\uparrow$  und  $\downarrow$  ein Zwei-Niveau-System gegeben ist. Quantenpunkte wurden schon in früheren Arbeiten theoretisch [5, 6] und in einer Vielzahl von Experimenten [6–9] untersucht. Das Elektron ist dabei von Kernspins des Substrats des Quantenpunktes umgeben. Ein häufig verwendetes Material ist zu Beispiel GaAs [6–8]. Die umgebenden Kernspins führen zur Dekohärenz des Elektronenspins, wodurch die Information des anfänglichen Zustands verloren geht. Um möglichst viele Gatter-Operationen durchführen zu können, ist deswegen eines der DiVincenzo-Kriterien eine lange Kohärenzzeit. Darum ist es essentiell zunächst den Dekohärenzprozess zu verstehen, um Maßnahmen zu entwickeln, welche die Kohärenzzeit verlängern, wie zum Beispiel durch Pulssequenzen [10].

In einem Quantenpunkt ist die dominierende Kopplung zwischen Elektronenspin und Kernspins über die Hyperfein-Wechselwirkung gegeben [6]. Dabei wirken die Kernspins als ein Bad auf den Elektronenspin. Ein geeignetes Modell um die Dynamik des Elektronenspins in so einem System zu beschreiben ist das sogenannte Zentralspinmo-

dell [6, 11], das von Gaudin eingeführt wurde [12, 13].

Für die Berechnung experimentell relevanter Observablen mit diesem Modell, wie zum Beispiel der Autokorrelationsfunktion, wurden eine Reihe verschiedener Ansätze entwickelt. Für kleine Bäder mit bis zu  $N = 20$  Spins kann eine Simulation über exakte Diagonalisierung (ED) [6] oder Chebyshev-Expansion (CET) [14–16] durchgeführt werden. Dabei sind auch Simulationen langer Zeiten möglich. Für stark polarisierte Anfangszustände ist ebenfalls eine analytische Lösung über den algebraischen Bethe-Ansatz möglich [13, 17]. Für unpolarisierte Anfangszustände kann eine Lösung über den Bethe-Ansatz in Kombination mit einem direkten Monte-Carlo-Sampling für sehr schwache bis starke Magnetfelder und Bäder mit bis zu  $N = 48$  Kernspins erreicht werden [18, 19]. Realistische Badgrößen liegen jedoch für einen Quantenpunkt bei  $N \approx 10^4$  bis  $10^6$  Kernspins [6, 11, 20, 21], weswegen es anderer Methoden zur Berechnung bedarf.

Die Zeitentwicklung des Zentralspins für größere Bäder mit bis zu  $N = 1000$  Kernspins kann über die Methode der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) berechnet werden, jedoch nur für eine sehr begrenzte Zeit [22, 23]. Für eine rein klassische Berechnung des Zentralspinmodells [11, 24] ist das Bewegungsgleichungssystem deutlich einfacher zu lösen. Das ermöglicht auch lange Zeiten für große Bäder, sogar im thermodynamischen Limes, zu berechnen [25]. Jedoch werden dabei quantenmechanische Effekte offensichtlich nicht beachtet.

Die Ergebnisse von Fauseweh *et al.* in Ref. [25] haben die Effizienz einer vollkommen klassischen Simulation allerdings deutlich erhöht. Ein approximativer Ansatz ist dabei orthonormale Felder aus Spinoperatoren einzuführen, die mithilfe des bekannten Lanczos-Algorithmus [26] hierarchisch aufgebaut sind. Dies liefert ein effizient lösbares Bewegungsgleichungssystem auch bei Badgrößen  $N \rightarrow \infty$ . Diese Arbeit setzt hier an und überführt diese Methodik in eine voll quantenmechanische Betrachtung. Dabei liegt der Fokus auf der Entwicklung einer passenden Operatorbasis mit den hierarchischen Feldern.

Dazu wird in Kapitel 2 zunächst das Zentralspinmodell eingeführt und erläutert. Für die Zeitentwicklung wird in dieser Arbeit die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen genutzt. Sie wird in Kapitel 3 zunächst vollkommen allgemein hergeleitet. Anschließend werden noch einige für das Zentralspinmodell spezifische Eigenschaften dieser Methode beschrieben.

In Kapitel 4 wird zunächst ein direkter, nicht-approximativer Ansatz für eine Operatorbasis ohne hierarchische Felder betrachtet. Dieser zeigt die Schwierigkeiten einer exakten quantenmechanischen Beschreibung.

Kapitel 5 beschäftigt sich anschließend mit der Entwicklung der voll quantenmechanischen Berechnung über die Methode der hierarchischen, orthonormalen Felder. Dabei sind zusätzliche Annahmen im Vergleich zur klassischen Lanczos-Methode nötig, die hauptsächlich auf den Ergebnissen von Seifert *et al.* in Ref. [27] basieren. Anschließend werden die Resultate der approximativen Methode präsentiert und mit etablierten Methoden wie der DMRG und der CET verglichen. Zusätzlich wird noch der Einfluss von einem externen Magnetfeld diskutiert.

Die Ergebnisse dieser Arbeit werden abschließend in Kapitel 6 zusammengefasst und ein Ausblick für weitere Forschungsmöglichkeiten gegeben.

## Kapitel 2

# Zentralspinmodell

Die Hyperfein-Wechselwirkung zwischen einem Elektronen- oder Lochspin  $\hat{\mathbf{S}}_0$ , umgeben von einem Bad aus Kernspins  $\hat{\mathbf{S}}_i$  in einem Quantenpunkt, lässt sich sehr gut über das Zentralspinmodell beschreiben. Eingeführt von Michel Gaudin ist es auch unter dem Namen Gaudin-Modell bekannt [12, 13]. Der Hamiltonoperator für die quantenmechanische Beschreibung des Systems ist in diesem Modell durch

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{S}}_0 \sum_{i=1}^N J_i \hat{\mathbf{S}}_i \quad (2.1)$$

gegeben, wobei  $\mathbf{S}_0$  der Zentralspin mit der Spinquantenzahl  $S = 1/2$  ist. Die Kopplungskonstanten  $J_i$  beschreiben die Stärke der als isotrop angenommenen Hyperfein-Wechselwirkung zwischen  $\mathbf{S}_0$  und  $N$  Badspins  $\mathbf{S}_i$ , die in dieser Arbeit ebenfalls einen Spin  $S = 1/2$  besitzen. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Kernspins in einem realistischen Quantenpunkt eine höhere Spinquantenzahl besitzen. Für die Spins im häufig genutzten Halbleiter GaAs gilt zum Beispiel  $S_{\text{GaAs}} = 3/2$  [21, 28]. Die Summe

$$\hat{\mathbf{B}} = \sum_{i=1}^N J_i \hat{\mathbf{S}}_i \quad (2.2)$$

wirkt wie ein effektives Magnetfeld auf den Zentralspin und wird auch als Overhauser-Feld bezeichnet. Die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Kernspins werden hier vernachlässigt, da deren typische Zeitskala ein bis zwei Größenordnungen größer als die Zeitskala der betrachteten Hyperfein-Wechselwirkung ist [6].

Wird zusätzlich der Einfluss eines externen Magnetfeldes betrachtet, ist das magnetische Moment der Kerne im Quantenpunkt im Vergleich zum Elektron gewöhnlich um drei Größenordnungen kleiner [24], weswegen hier nur die Wechselwirkung des Magnetfeldes mit dem Zentralspin beachtet wird. Dies führt zum erweiterten Hamiltonoperator

$$\hat{H}^\alpha(h) = \hat{H} - h \hat{S}_0^\alpha \quad (2.3)$$

mit der Magnetfeldstärke  $h$  in Richtung der Komponente  $\alpha$ .

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Zentralspins am Ort  $\mathbf{r}_i$  kann durch die Verteilung

$$|\Psi(\mathbf{r}_i)|^2 \propto \exp\left[-\left(\frac{r_i}{R}\right)^m\right], \quad m \in \{1, 2\} \quad (2.4)$$

beschrieben werden [14, 29, 30]. Dabei gibt  $R$  den charakteristischen Radius der hyperfein koppelnden Kernspins an. Die Wellenfunktion  $\Psi$  beschreibt für  $m = 1$  einen wasserstoff-ähnlichen  $s$  Zustand, während  $p = 2$  einen gaußverteilten Verlauf mit Bohr-Radius  $R$  darstellt. Die Größe  $N_0$  beschreibt nun die Anzahl der Kernspins innerhalb des Radius  $R$ . In  $d$  Dimensionen ist dann  $(r_i/R)^d = i/N_0 = \gamma i$ . In dieser Arbeit wird die gaußverteilte Wellenfunktion für einen zweidimensionalen Quantenpunkt verwendet, sodass  $m = d = 2$  gilt, was letztendlich die exponentielle Verteilung [25, 27, 29]

$$J_i = J e^{-\gamma i} \quad (2.5)$$

für die Kopplungen liefert. Dabei ist  $i \in \{1 \dots N\}$ . Die Energiekonstante  $J$  wird so gewählt, dass

$$J_Q^2 := \sum_{i=1}^N J_i^2 = 1 \quad (2.6)$$

gilt. Dadurch dass in dieser Arbeit natürliche Einheiten ( $\hbar = 1$ ) betrachtet werden, legt  $J_Q$  die natürliche Energieskala und gleichzeitig eine Zeitskala fest. Deshalb wird die Simulationszeit  $t$  in den folgenden Kapiteln immer in der Einheit  $1/J_Q$  angegeben, welche im Experiment der Größenordnung einer Nanosekunde entspricht [31]. Weiterhin wird das Verhältnis der Gesamtanzahl der Spins  $N$  zu der Anzahl der Spins  $N_0$  innerhalb des Wahrscheinlichkeitsradius  $R$  über

$$x := \frac{N}{N_0} \quad (2.7)$$

definiert, sodass  $\gamma = x/N$  gilt. Damit ist die geringste Kopplung über  $J_N \propto \exp(-x)$  gegeben. In dieser Arbeit werden unter anderem auch potentiell unendliche Bäder betrachtet, für die  $x \rightarrow \infty$  gilt. Auch für diese Systeme existiert nur eine endliche, von  $\gamma$  abhängige Anzahl  $N_{\text{eff}}$  der Kernspins die effektiv an den physikalischen Prozessen beteiligt ist [25]. Um dies zu zeigen wird zunächst die Summe

$$J_S := \sum_{i=1}^N J_i \quad (2.8)$$

eingeführt. Bei einer Betrachtung mit konstanten Kopplungen  $J_i = C$  gilt offensichtlich  $J_S^2 = C^2 N^2$ , sowie  $J_Q^2 = C^2 N$ , wodurch deutlich wird, dass der Quotient  $J_S^2/J_Q^2 = N$  die Anzahl der Badspins wiedergibt. Dieses Vorgehen kann nun ebenfalls für die exponentiellen Kopplungen (2.5) durchgeführt werden. Es ergibt sich im Limes unendlicher

---

Bäder

$$J_S^2 = \left( \sum_{i=1}^{\infty} J e^{-\gamma i} \right)^2 = J^2 \frac{e^{-2\gamma}}{(1 - e^{-\gamma})^2} \quad , \quad (2.9a)$$

$$J_Q^2 = \sum_{i=1}^{\infty} J^2 e^{-2\gamma i} = J^2 \frac{e^{-2\gamma}}{1 - e^{-2\gamma}} \quad . \quad (2.9b)$$

Der Quotient dieser beiden Größen liefert nun auch für die exponentiellen Kopplungen die Anzahl der Kernspins. Jedoch konvergiert diese für  $\gamma > 0$  gegen den Effektivwert

$$N_{\text{eff}} = \frac{J_S^2}{J_Q^2} = \frac{1 - e^{-2\gamma}}{(1 - e^{-\gamma})^2} = \frac{2}{\gamma} + \mathcal{O}(\gamma^0) \quad . \quad (2.10)$$

Im letzten Schritt wurde angenommen, dass  $\gamma \ll 1$  gilt. Diese Annahme ist hier legitim, da für einen Quantenpunkt typischerweise  $N_{\text{eff}} \approx 10^4$  bis  $10^6$  und somit  $\gamma \approx 10^{-4}$  bis  $10^{-6}$  gilt.

Hauptsächlich werden in dieser Arbeit die normierten exponentiellen Kopplungen (2.5) verwendet. Basierend auf Ref. [24] wird jedoch im Zusammenhang mit Magnetfeldern auch ein Vergleich von Simulationen mit der linear abfallenden Kopplungsverteilung

$$J_i = \sqrt{\frac{6N}{2N^2 + 3N + 1}} \frac{N + 1 - i}{N} J_Q \quad (2.11)$$

durchgeführt.

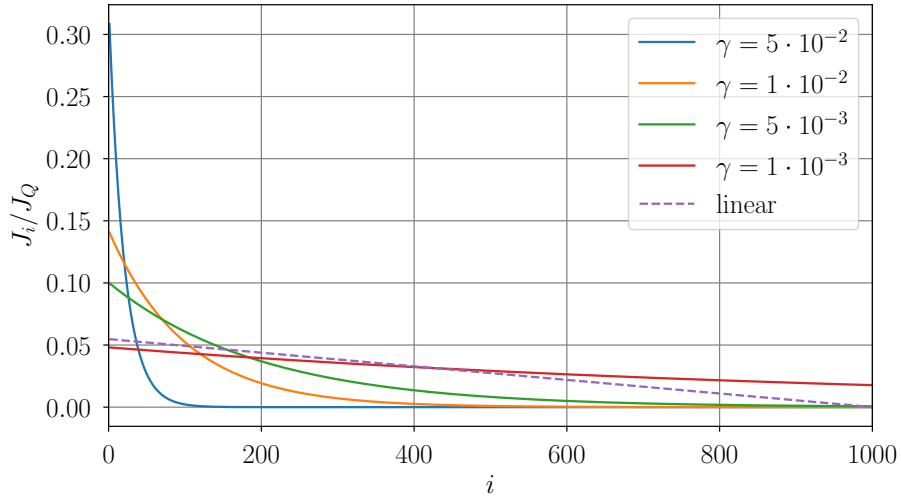


Abbildung 2.1: Darstellung der exponentiellen Kopplungskonstanten (2.5) für verschiedene Parameter  $\gamma$  und der linearen Kopplung (2.11) bei  $N = 1000$  Spins. Die Kopplungen sind dabei über den Faktor  $J_Q^{-1}$  (2.6) normiert.

Zur Veranschaulichung ist die normierte Kopplungskonstante  $J_i/J_Q$  für verschiedene  $\gamma$  bei einer Anzahl von  $N = 1000$  Spins in Abbildung 2.1 dargestellt. Für große  $\gamma$  liefern offensichtlich nur wenige, stark koppelnde Kernspins die komplette Dynamik, da die Kopplungskonstanten für größere  $i$  schnell abfallen. Für realistischere  $\gamma$  hingegen wird der deutlich schwächere Abfall der Kopplungsstärke sichtbar und damit auch der steigende Einfluss von immer mehr Kernspins. Dabei bestimmen die schwächeren Kopplungen das Langzeitverhalten des Zentralspins [25, 29, 32].

In dieser Arbeit wird die  $zz$ -Autokorrelationsfunktion als Observable genutzt. Sie ist durch

$$S(t) := \left\langle \hat{S}_0^z(t) \hat{S}_0^z(0) \right\rangle = \frac{1}{4} \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{\sigma}_0^z(t) \hat{\sigma}_0^z(0)) \quad (2.12)$$

definiert. Diese Autokorrelation beschreibt die Änderung des Zustands der  $z$ -Komponente des Zentralspins  $\hat{S}_0^z(t)$  zum Startzustand  $\hat{S}_0^z(0)$ . Nun ist zu beachten, dass die charakteristische thermische Energie  $k_B T$  der Umgebung im Experiment mindestens eine Größenordnung über der intrinsischen Energie des Quantenpunktes liegt [8]. Demnach ist es eine realistische Annahme eine unendliche Temperatur und somit ein völlig ungeordnetes Bad zu betrachten. Diese initialen Bedingungen entsprechen dem Dichteoperator

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\dim \mathcal{H}} \mathbb{1} \quad . \quad (2.13)$$

Dabei beschreibt  $\mathcal{H}$  den Hilbertraum des betrachteten Systems. Da Zentralspin und Kernspins einen Spin  $S = 1/2$  besitzen, ist dessen Dimension hier durch  $\dim \mathcal{H} = 2^{N+1}$  gegeben.

Nun muss eine Methode eingeführt werden, mit der die Zeitentwicklung der  $z$ -Komponente des Zentralspins  $\hat{S}_0^z(t)$  im vorgestellten Modell durchgeführt werden kann. Diese wird im nächsten Kapitel erläutert.

## Kapitel 3

# Iterierte Bewegungsgleichungen

Die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen bietet eine relativ einfache Möglichkeit, ein Bewegungsgleichungssystem für einen zeitabhängigen Operator aufzustellen, welches mit bekannten Verfahren wie Runge-Kutta oder exakter Diagonalisierung gelöst werden kann. Deshalb soll sie in dieser Arbeit für die Zeitentwicklung des Zentralspins zum Einsatz kommen. Dazu wird die Methodik zunächst für allgemeine zeitabhängige Operatoren erläutert. Anschließend wird kurz Bezug auf das in Kapitel 2 eingeführte Zentralspin-Modell genommen.

Ausgangspunkt für die Zeitentwicklung mit iterierten Bewegungsgleichungen ist die Heisenberg-Gleichung. Diese besagt für die Ableitung des zeitabhängigen Operators  $\hat{O}_i(t)$  im Heisenberg-Bild, dass

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_i(t) = i \left[ \hat{H}, \hat{O}_i(t) \right] = i\mathcal{L}\hat{O}_i(t) \quad (3.1)$$

gilt. Dabei ist  $\mathcal{L}$  der Liouville-Superoperator, welcher eine kürzere Schreibweise für die Kommutation eines Operators mit dem Hamiltonoperator darstellt. Es kann nun eine orthonormale Basis  $\mathcal{B} = \{\hat{b}_0, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_K\}$  mit den Operatoren  $\hat{b}_k$  im Schrödinger-Bild gefunden werden, mit welcher der zeitabhängige Operator durch die Reihe

$$\hat{O}_i(t) = \sum_k \xi_{ik}(t) \hat{b}_k \quad (3.2)$$

dargestellt werden kann. Damit ist die Zeitabhängigkeit nun durch die skalaren Koeffizienten  $\xi_{ik}(t)$  bestimmt, die zum Zeitpunkt  $t = 0$  durch

$$\xi_{ik}(0) = \begin{cases} 1, & k = i \\ 0, & k \neq i \end{cases} \quad (3.3)$$

gegeben sind. Initial gilt demnach  $\hat{O}_i(0) = \hat{b}_0$ . Um  $\hat{O}_i(t)$  in der Zeit zu entwickeln, muss nun eine passende Basis gefunden und ein Bewegungsgleichungssystem für die Koeffizienten der Basisoperatoren  $\xi_{ik}(t)$  aufgestellt werden. Die Idee der iterierten Bewegungsgleichungen ist, das gesuchte Bewegungsgleichungssystem durch iteratives Anwenden des Liouville-Operators auf den initialen Operator  $\hat{b}_0$  aufzubauen. Sie basiert

darauf, dass bei jeder Anwendung auf einen allgemeinen Operator aus der Untermenge  $\mathcal{B}_{\text{sub}} \subset \mathcal{B}$  nach

$$\mathcal{L}\hat{b}_i = \sum_k \Gamma_{ik} \hat{b}_k \quad (3.4)$$

neue Operatoren  $b_k \in \mathcal{B}$  mit den Koeffizienten  $\Gamma_{ik}$  entstehen. Durch das iterative Anwenden kann  $\mathcal{B}_{\text{sub}}$  so schrittweise erweitert und durch  $\Gamma_{ik}$  das gesuchte Bewegungsgleichungssystem aufgebaut werden.

Dazu wird nun zunächst die initiale Menge  $\mathcal{B}_0 = \{\hat{b}_0\} \subset \mathcal{B}$  definiert. Durch einmalige Anwendung des Liouville-Operators entstehen nach (3.4) bekanntlich die neuen Basisoperatoren  $\hat{b}_k$ , welche in der neuen Menge  $\mathcal{B}_1 \subset \mathcal{B}$  enthalten sind. Die erweiterte Menge der Basisoperatoren nach einem Iterationsschritt ergibt sich sodann aus der Vereinigung

$$\mathcal{B}_{\text{gesamt}}^1 = \mathcal{B}_0 \cup \mathcal{B}_1 \quad . \quad (3.5)$$

Ist  $\mathcal{B}_l \subseteq \mathcal{B}$  die Menge der Basisoperatoren, die durch die  $l$ -te Anwendung des Liouville-Operators entsteht, so gilt demnach allgemein für die Menge aller Basisoperatoren nach  $L$  Anwendungen

$$\mathcal{B}_{\text{gesamt}}^L = \bigcup_{l=0}^L \mathcal{B}_l \quad . \quad (3.6)$$

Nun ist nach Gleichung (3.4) die Zeitableitung des Basisoperators  $\hat{b}_i$  über die Koeffizienten  $\Gamma_{ik}$  an die Basisoperatoren  $\hat{b}_k$  gekoppelt. Dies kann genutzt werden, um das für die zeitabhängigen Koeffizienten  $\xi_{ik}(t)$  aus Gleichung (3.2) gesuchte Bewegungsgleichungssystem aufzustellen. Dazu wird nun (3.2) in die Heisenberg-Gleichung (3.1) eingesetzt. Dadurch gilt

$$\frac{d}{dt} \sum_k \xi_{ik}(t) \hat{b}_k = i \sum_k \xi_{ik}(t) \mathcal{L} \hat{b}_k \quad (3.7a)$$

$$= i \sum_k \xi_{ik}(t) \sum_j \Gamma_{kj} \hat{b}_j \quad . \quad (3.7b)$$

Dabei wird im zweiten Schritt nur die Definition (3.4) eingesetzt. Da  $k$  und  $j$  über dieselben Werte laufen, können die Indizes vertauscht werden, sodass gilt

$$\frac{d}{dt} \sum_k \xi_{ik}(t) \hat{b}_k = i \sum_{k,j} \xi_{ij}(t) \Gamma_{jk} \hat{b}_k \quad (3.7c)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} (\boldsymbol{\xi}_i(t))^T \hat{\mathbf{b}} = i (\boldsymbol{\xi}_i(t))^T \boldsymbol{\Gamma} \hat{\mathbf{b}} \quad . \quad (3.7d)$$

Durch Vergleich der Koeffizienten der Basisoperator-Vektoren  $\hat{\mathbf{b}}$  und transponieren auf beiden Seiten der Gleichung (3.7d) ergibt sich das finale Bewegungsgleichungssystem

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\xi}_i(t) = i \boldsymbol{\Gamma}^T \boldsymbol{\xi}_i(t) \quad , \quad (3.7e)$$

wobei die Matrix  $\mathbf{\Gamma}$  quadratisch ist und nach  $L$  Iterationsschritten die Dimension  $|\mathcal{B}_{\text{gesamt}}^L| \times |\mathcal{B}_{\text{gesamt}}^L|$  hat. Diese Matrix soll in dieser Arbeit als Liouville-Matrix bezeichnet werden.

Um mithilfe von (3.7e) den gewünschten Operator  $\hat{O}_i(t)$  sinnvoll in der Zeit entwickeln zu können, muss für die iterativ entstehende Basis  $\mathcal{B}$  ein Skalarprodukt definiert werden, für das

$$(\mathcal{L}\hat{b}_i | \hat{b}_j) = (\hat{b}_i | \mathcal{L}\hat{b}_j) \quad (3.8)$$

gilt. Dann ist die Matrix  $\mathbf{\Gamma}$  hermitesch [33], wodurch sie lediglich reelle Eigenwerte besitzt und eine exponentielle Divergenz in der Zeitentwicklung ausgeschlossen ist. Ein Skalarprodukt, welches die Eigenschaft (3.8) erfüllt, ist durch

$$(\hat{A} | \hat{B}) := \frac{1}{\dim \mathcal{H}} \text{Tr} (\hat{A}^\dagger \hat{B}) \quad (3.9)$$

definiert, wie eine kurze Rechnung zeigt. Da der Normierungsfaktor  $1/\dim \mathcal{H}$  für den Beweis von (3.8) zunächst irrelevant ist, soll hier nur die Spur betrachtet werden. Dann gilt

$$\text{Tr} \left( (\mathcal{L}\hat{A})^\dagger \hat{B} \right) = \text{Tr} \left( (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})^\dagger \hat{B} \right) \quad (3.10a)$$

$$= \text{Tr} \left( \hat{A}^\dagger \hat{H}^\dagger \hat{B} - \hat{H}^\dagger \hat{A}^\dagger \hat{B} \right) \quad (3.10b)$$

$$= \text{Tr} \left( \hat{A}^\dagger (\hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H}) \right) \quad (3.10c)$$

$$= \text{Tr} \left( \hat{A}^\dagger \mathcal{L}\hat{B} \right) \quad (3.10d)$$

Demnach erfüllt die Spur die Eigenschaft (3.8) für beliebige Operatoren. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Definition des Skalarprodukts (3.9) nur für Operatoren mit lokal endlich-dimensionalen Hilberträumen sinnvoll ist. Da in dieser Arbeit allerdings nur Spinoperatoren betrachtet werden, ist diese Bedingung erfüllt. Bilden nun die Basisoperatoren zusätzlich eine Orthonormalbasis, so sind die Matrixelemente über

$$(\mathcal{L}\hat{b}_i | \hat{b}_j) = \sum_k \Gamma_{ik} (\hat{b}_k | \hat{b}_j) = \sum_k \Gamma_{ik} \delta_{kj} = \Gamma_{ij} = \Gamma_{ji}^* \quad (3.11)$$

definiert.

Im Zentralspin-Modell, welches in Kapitel 2 beschrieben wird, ist der zeitabhängige Operator durch die  $z$ -Komponente des Zentralspins  $\hat{\sigma}_0^z(t)$  gegeben. Damit ist der initiale Basisoperator für die iterierten Bewegungsgleichungen durch

$$\hat{b}_0 = \hat{\sigma}_0^z(0) = \hat{\sigma}_0^z \quad (3.12)$$

bestimmt. Nun enthält der Hamiltonoperator (2.1) nur Spin-Operatoren, wodurch die gesamte Basisentwicklung durch Operationen der Spin-Algebra für  $S = 1/2$  durchgeführt werden kann. Dabei soll in dieser Arbeit, mit den  $(2 \times 2)$ -Einheitsmatrizen  $\mathbb{1}_2$

und  $m \in \{0,1,2,3\}$ , die Definition

$$\hat{\sigma}_j^m = \left( \bigotimes_{i=0}^{j-1} \mathbb{1}_2 \right) \otimes \tilde{\sigma}_j^m \otimes \left( \bigotimes_{i=j+1}^N \mathbb{1}_2 \right) \quad (3.13)$$

gelten. Für die Pauli-Matrizen werden in dieser Arbeit außerdem die beiden äquivalenten Notationen

$$\hat{\sigma}_j^0 \equiv \mathbb{1} \quad \hat{\sigma}_j^1 \equiv \hat{\sigma}_j^x \quad \hat{\sigma}_j^2 \equiv \hat{\sigma}_j^y \quad \hat{\sigma}_j^3 \equiv \hat{\sigma}_j^z \quad (3.14)$$

genutzt. Für die Entwicklung der Basisoperatoren in den folgenden Kapiteln sind außerdem noch die bekannten Relationen

$$\left[ \hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta \right] = 2i \sum_{\zeta} \epsilon_{\alpha\beta\zeta} \hat{\sigma}_i^\zeta \delta_{ij} \quad , \quad (3.15a)$$

$$\hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta = \left( i \sum_{\zeta} \epsilon_{\alpha\beta\zeta} \hat{\sigma}_i^\zeta + \sigma_i^0 \delta_{\alpha\beta} \right) \delta_{ij} + \hat{\sigma}_j^\beta \hat{\sigma}_i^\alpha (1 - \delta_{ij}) \quad (3.15b)$$

essentiell, wobei griechische Buchstaben in dieser Arbeit immer Elemente der Menge der dreidimensionalen Raumrichtungen  $\{x,y,z\}$  sind.

In den folgenden zwei Kapiteln wird nun die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen für das Zentralspinmodell angewendet. Dabei liegt der Fokus der Betrachtung auf zwei unterschiedlichen Ansätzen für die Definition von Basisoperatoren. Deren Anzahl bestimmt die Größe des zu lösenden Bewegungsgleichungssystems und ist somit der limitierende Faktor. Dabei ist wichtig, wie die Basisgröße in der Zeit  $t$  und Systemgröße  $N$  skaliert.

## Kapitel 4

# Direkte Basisentwicklung

Wird der Liouville-Operator iterativ auf den initialen Basisoperator  $\hat{\sigma}_0^z$  angewendet, so sind die neu entstehenden Operatoren im Allgemeinen Produkte von Pauli-Matrizen. Ein naiver Ansatz für eine Basis für die iterierten Bewegungsgleichungen ist nun, die Basisoperatoren direkt über diese Spinoperatorprodukte zu definieren.

### 4.1 Basisoperator

Ein beliebiges Produkt von Spinoperatoren kann wegen der Relationen (3.15a) und (3.15b) immer so zusammengefasst werden, dass maximal ein Operator pro Platz  $i$  vorhanden ist. Dessen Komponente kann die Werte  $m_{k,i} \in \{0,1,2,3\}$  annehmen. Dabei bedeutet  $m_{k,i} \in \{1,2,3\}$ , dass dieser Platz besetzt ist, und  $m_{k,i} = 0$ , dass dort der triviale Operator  $\hat{\sigma}_i^0$  steht. Da die Reihenfolge der Operatoren an unterschiedlichen Plätzen irrelevant ist, kann ein allgemeiner Basisoperator nun durch

$$\hat{b}_k := \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} = \hat{\sigma}_0^{m_{k,0}} \cdot \hat{\sigma}_1^{m_{k,1}} \cdot \dots \cdot \hat{\sigma}_N^{m_{k,N}} \quad (4.1)$$

dargestellt werden. Für den initialen Basisoperator  $\hat{b}_0 = \hat{\sigma}_0^z$  gilt demnach in dieser Darstellung  $m_{0,i} = 0 \forall i \in \{1 \dots N\}$  und  $m_{0,0} = 3$ . Damit eine einfache Berechnung der Matrixelemente für die Liouville-Matrix nach (3.11) möglich ist, müssen diese Operatoren orthonormal zueinander sein, was nun im Bezug auf das Skalarprodukt (3.9) gezeigt werden soll.

Da die Pauli-Matrizen hermitesch sind und die Reihenfolge der Operatoren irrelevant ist, ist ein allgemeiner Basisoperator nach

$$\hat{b}_k^\dagger = \left( \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \right)^\dagger = \prod_{i=0}^N (\hat{\sigma}_i^{m_{k,i}})^\dagger = \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} = \hat{b}_k \quad (4.2)$$

ebenfalls hermitesch. Wird nun das Skalarprodukt zweier allgemeiner Basisoperatoren

gebildet, so gilt nach

$$\left(\hat{b}_k \middle| \hat{b}_l\right) = \frac{1}{2^{N+1}} \text{Tr} \left( \prod_{i=0}^N (\hat{\sigma}_i^{m_{k,i}})^\dagger \hat{\sigma}_i^{m_{l,i}} \right) \quad (4.3a)$$

$$= \frac{1}{2^{N+1}} \prod_{i=0}^N \text{Tr} \left( \tilde{\sigma}_i^{m_{k,i}} \tilde{\sigma}_i^{m_{l,i}} \right) \quad (4.3b)$$

$$= \frac{1}{2^{N+1}} \prod_{i=0}^N 2\delta_{m_{k,i} m_{l,i}} \quad (4.3c)$$

$$= \delta_{kl} \quad , \quad (4.3d)$$

dass diese Orthonormal zueinander sind. Dabei ist zu beachten, dass im zweiten Schritt die auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}^{2 \times 2}$  definierten Pauli-Matrizen  $\hat{\sigma}_i^m$  eingesetzt wurden. Die gewählte Definition der Basisoperatoren liefert demnach eine Orthonormalbasis, welche nun für die Anwendung der iterierten Bewegungsgleichungen genutzt wird.

## 4.2 Allgemeine Basis-Entwicklung und Trunkierung

Um die Entwicklung der Basis in jedem Iterationsschritt besser zu verstehen, ist es hilfreich, die Anwendung des Liouville-Operators auf einen allgemeinen Basisoperator zu betrachten. Dies liefert

$$\mathcal{L}\hat{b}_k = \sum_{j=1}^N J_j \left[ \hat{S}_0^\alpha \hat{S}_j^\alpha, \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \right] \quad (4.4a)$$

$$= \sum_{j=1}^N J_j \left( \left[ \hat{S}_0^\alpha, \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \right] \hat{S}_j^\alpha + \hat{S}_0^\alpha \left[ \hat{S}_j^\alpha, \prod_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \right] \right) \quad (4.4b)$$

$$= \sum_{j=1}^N \frac{J_j}{2} \left( \left[ \hat{S}_0^\alpha, \hat{\sigma}_0^{m_{k,0}} \right] \prod_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \hat{\sigma}_j^\alpha + \hat{\sigma}_0^\alpha \prod_{i=0}^{j-1} \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \left[ \hat{S}_j^\alpha, \hat{\sigma}_j^{m_{k,j}} \right] \prod_{l=j+1}^N \hat{\sigma}_l^{m_{k,l}} \right) \quad (4.4c)$$

$$= i \sum_{j=1}^N \sum_{\gamma} \frac{J_j}{2} \epsilon_{\alpha m_{k,0} \gamma} (1 - \delta_{m_{k,0} 0}) \hat{\sigma}_0^\gamma \overbrace{\prod_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \hat{\sigma}_j^\alpha}^{=: \tilde{b}_{k,j}^{\alpha\gamma}} \quad (4.4d)$$

$$+ i \sum_{j=1}^N \sum_{\gamma} \frac{J_j}{2} \epsilon_{\alpha m_{k,j} \gamma} (1 - \delta_{m_{k,j} 0}) \hat{\sigma}_0^\alpha \prod_{i=0}^{j-1} \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \hat{\sigma}_j^\gamma \prod_{l=j+1}^N \hat{\sigma}_l^{m_{k,l}} \quad . \quad (4.4e)$$

Der Anteil (4.4d) der allgemeinen Basisentwicklung beinhaltet nun die Erkenntnis, dass nach  $n \leq N$  Iterationsschritten der iterierten Bewegungsgleichungen die Basisoperatoren mit der größten Anzahl besetzter Plätze aus genau  $(n + 1)$  Pauli-Matrizen mit

$m_{k,i} \neq 0$  bestehen. Um dies zu zeigen werden die in (4.4d) definierten, neuen Basisoperatoren  $\tilde{b}_{k,j}^{\alpha\gamma}$  betrachtet. Für diese gilt allgemein

$$\sum_{j=1}^N \tilde{b}_{k,j}^{\alpha\gamma} = \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_0^\gamma \prod_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^{m_{k,i}} \hat{\sigma}_j^\alpha \quad . \quad (4.5)$$

Der Ausgangspunkt ist nun zunächst der initiale Basisoperator  $\hat{b}_0$ , für den  $m_{0,i} = 0$  für  $i > 0$  gilt. Da demnach alle Plätze  $i \in \{1, \dots, N\}$  dieses Operators unbesetzt sind, besetzt die Pauli-Matrix  $\hat{\sigma}_j^\alpha$ , die aus der Anwendung des Liouville-Operators auf  $\hat{b}_0$  entsteht, in den neuen Basisoperatoren offensichtlich einen zusätzlichen Platz. Dadurch haben diese Operatoren nach einem Iterationsschritt nun zwei besetzte Plätze und sind durch

$$\tilde{b}_{0,j}^{\alpha\gamma} = \hat{\sigma}_0^\gamma \hat{\sigma}_j^\alpha \quad (4.6)$$

gegeben. Vor dem  $n$ -ten Iterationsschritt haben die Basisoperatoren mit der maximalen Anzahl an besetzten Plätzen demnach genau  $n$  besetzte und  $(N + 1 - n)$  unbesetzte Plätze. Solange nun  $n \leq N$  gilt, haben diese Basisoperatoren somit mindestens einen unbesetzten Platz. Da  $j$  über alle Plätze im Bad läuft, wird es mindestens ein  $j$  geben sodass der unbesetzte Platz nach

$$\tilde{b}_{k,j}^{\alpha\gamma} = \hat{\sigma}_0^\gamma \cdot \hat{\sigma}_1^{m_{k,1}} \cdot \dots \cdot \hat{\sigma}_{j-1}^{m_{k,j-1}} \cdot \mathbb{1} \cdot \hat{\sigma}_{j+1}^{m_{k,j+1}} \cdot \dots \cdot \hat{\sigma}_N^{m_{k,N}} \cdot \hat{\sigma}_j^\alpha \quad (4.7a)$$

$$= \hat{\sigma}_0^\gamma \cdot \hat{\sigma}_1^{m_{k,1}} \cdot \dots \cdot \hat{\sigma}_{j-1}^{m_{k,j-1}} \cdot \hat{\sigma}_j^\alpha \cdot \hat{\sigma}_{j+1}^{m_{k,j+1}} \cdot \dots \cdot \hat{\sigma}_N^{m_{k,N}} \quad (4.7b)$$

besetzt wird. Der neu entstandene Operator (4.7b) hat demnach eine Pauli-Matrix zusätzlich. Im Umkehrschluss besitzen die maximal besetzten Basisoperatoren im Fall  $n = (N + 1)$  keinen unbesetzten Platz mehr, wodurch sich am Platz  $j$  nach der Relation (3.15b) entweder nur die Komponente ändert, oder im Fall  $\alpha = m_{k,j}$  eine Einheitsmatrix entsteht und dieser demnach nicht mehr besetzt ist.

Durch die Wahl der Basisoperatoren  $\hat{b}_k$  ist direkt ersichtlich, dass für ein endliches System nur eine endliche Anzahl an Basisoperatoren benötigt wird, da nur endlich viele Kombinationen der  $\hat{\sigma}_i^{m_{k,i}}$  existieren. Nun ist jedoch ebenfalls gezeigt, dass die Anzahl der entstehenden Basisoperatoren für eine unendliche Systemgröße divergiert. Dadurch ist in diesem Fall eine Trunkierung notwendig. Jedoch zeigt sich im nächsten Abschnitt, dass die Basisgröße für die definierten Operatoren exponentiell mit der Badgröße  $N$  ansteigt, wodurch ebenfalls bei endlichen Systemen schon für relativ kleine Badgrößen eine Trunkierung notwendig wird.

Wird die Anzahl der Basisoperatoren  $S_B$  und der von Null verschiedenen Einträge  $S_{LM}$  der Liouville-Matrix in Abhängigkeit der Badgröße  $N$  betrachtet, so können Skalierungsfunktionen gefunden werden. Die Paulimatrizen an einem Platz haben vier mögliche verschiedene Komponenten. Da bei einer exakten Berechnung vermutlich alle Kombinationen der Badspins vorkommen, wird eine Skalierung in der Größenordnung  $\mathcal{O}(4^N)$  liegen. Bei Betrachtung von Tabelle 4.1 bestätigt sich diese Annahme. Dabei

| $N$ | $S_B(N)$ | $S_{LM}(N)$ | $S_{LM}(N)/S_B(N)$ |
|-----|----------|-------------|--------------------|
| 0   | 1        | 0           | 0,000              |
| 1   | 4        | 8           | 2,000              |
| 2   | 15       | 48          | 3,200              |
| 3   | 64       | 288         | 4,500              |
| 4   | 255      | 1536        | 6,024              |
| 5   | 1024     | 7680        | 7,500              |
| 6   | 4095     | 36864       | 9,002              |
| 7   | 16384    | 172032      | 10,500             |
| 8   | 65535    | 786432      | 12,000             |
| 9   | 262144   | 3538944     | 13,500             |
| 10  | 1048575  | 15728640    | 15,000             |

Tabelle 4.1: Skalierung  $S_B(N)$  der Anzahl der Basisoperatoren und  $S_{LM}(N)$  der Anzahl der von Null verschiedenen Matrixeinträge in Abhängigkeit der Badgröße  $N$  sowie der Quotient beider Werte.

entsteht für gerade  $N$  für  $N > 0$  ein zusätzlicher konstanter Faktor. Es ergibt sich quantitativ

$$S_B(N) = 4^N - ((N + 1) \bmod 2) \quad \text{für} \quad N > 0 \quad . \quad (4.8)$$

Um die Skalierung der Anzahl der von Null verschiedenen Einträge der Liouville-Matrix  $S_{LM}(N)$  in Abhängigkeit der Badgröße zu erhalten ist eine Betrachtung des Quotienten der Anzahl dieser Einträge und  $S_B(N)$  hilfreich, welcher in Abbildung 4.1 dargestellt ist. Mit der Ausnahme von  $N = 1$  folgt der Quotient für ungerade Badgrößen der linearen Funktion

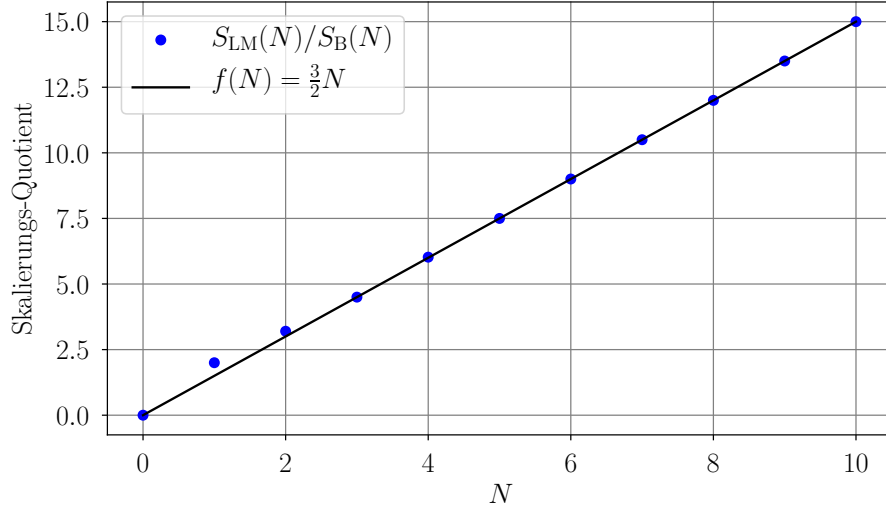
$$f(N) = \frac{3}{2}N \quad . \quad (4.9)$$

Für gerade Badgrößen ist eine Abweichung zu erkennen, welche durch den Summanden  $S_{\text{mod}}(N) = -((N + 1) \bmod 2)$  entsteht. Da dieser jedoch konstant ist, wird die Abweichung für größer werdende  $N$  schnell vernachlässigbar klein. Für große Badgrößen kann demnach die Anzahl der Matrixelemente durch die Skalierungsfunktion

$$S_{LM}(N) \approx \frac{3}{2}N \cdot S_B(N) = \frac{3}{2}N \cdot 4^N \quad (4.10)$$

angegeben werden. Eine Skalierung der Anzahl der Matrixeinträge von der Ordnung  $\mathcal{O}(N \cdot 4^N)$  limitiert die lösbare Badgröße sehr stark, da schon für kleine Bäder sehr große Speichermengen für die Berechnung des Bewegungsgleichungssystems nötig sind.

An dieser Stelle wird die Wichtigkeit eines geeigneten Trunkierungsschemas ersichtlich. Die Skalierungen der Basis  $S_B(N)$  und der von Null verschiedenen Matrixeinträge  $S_{LM}(N)$  gelten für die exakte Berechnung des Problems. Die Trunkierung dient dazu, eine approximative Lösung zu erhalten, welche mit weniger Basisoperatoren auskommt,



Abbildungung 4.1: Differenzenquotient der Skalierungsfunktionen  $S_{\text{LM}}(N)/S_{\text{B}}(N)$  mit Vergleichsgeraden  $f(N) = \frac{3}{2}N$ .

dabei jedoch immer noch möglichst nah an der exakten Lösung liegt. Nun ist die Anzahl der besetzten Plätze  $\mathcal{A}(b_k)$  eines Basisoperators  $\hat{b}_k$  ein Ansatzpunkt für dieses Schema. Eine einfache Trunkierung besteht darin einen Basisoperator  $\hat{b}_k$  nur dann zur Basis hinzuzufügen, wenn

$$\mathcal{A}(b_k) < P_{\max} \quad , \quad (4.11)$$

wobei  $P_{\max}$  der maximalen Anzahl der Spinoperatoren verschiedener Plätze in diesem Operator entspricht.

Dieser Ansatz wird nun dazu genutzt mittels der iterierten Bewegungsgleichungen die Zeitentwicklung des Zentralspins zu simulieren. Die Resultate werden im nächsten Kapitel diskutiert.

## 4.3 Resultate

Bevor auf das zuvor erläuterte Trunkierungsschema näher eingegangen wird, werden einige Überlegungen zu exakten Lösungen angestellt. Dabei wird unter anderem auch die Wahl verschiedener Parameter  $x$  für die Kopplungskonstanten  $J_i$  betrachtet.

### 4.3.1 Exakte Lösung

Als exakte Lösung wird hier der Fall  $P_{\max} = (N + 1)$  bezeichnet. Da im Hamiltonoperator nur  $(N + 1)$  verschiedene Plätze betrachtet werden, können auch nur maximal so viele Plätze durch einen Basisoperator beschrieben werden. Demnach werden durch die iterierten Bewegungsgleichungen alle nötigen Basisoperatoren für die Zeitentwicklung bestimmt und damit auch alle Wechselwirkungsprozesse beachtet.

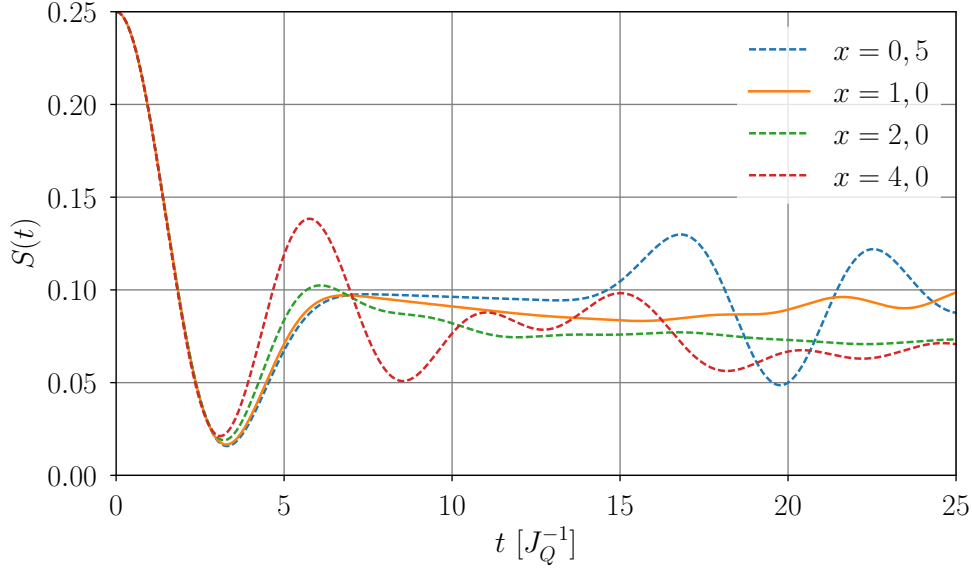


Abbildung 4.2: Vergleich der exakten Lösung mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen für verschiedene Parameter  $x$ . Dabei ist die Badgröße  $N = 10$ .

Nun muss zunächst ein passender Parameter  $x$  für die Kopplungsverteilung gewählt werden. Um den Einfluss dieser Größe genauer zu analysieren sind in Abbildung 4.2 Simulationen für verschiedene  $x$  dargestellt. Die Badgröße beträgt dabei  $N = 10$  Kernspins. Für  $x = 0,5$  verläuft die Kopplungsverteilung relativ flach. Dadurch sind die Kopplungen lange von derselben Größenordnung, wie schon aus Abbildung 2.1 deutlich wird. Der charakteristische Abfall der Autokorrelation nach dem ersten Minimum ist deswegen relativ gering. Da das betrachtete System endlich ist, sind jedoch nach kurzer Zeit relativ starke Schwankungen zu sehen. Sie entstehen dadurch, dass das System nur aus sehr wenigen Badspins besteht und werden auch Finite-Size-Effekte genannt. Da ein Quantenpunkt jedoch aus  $N \approx 10^4$  bis  $10^6$  Kernspins besteht sind diese Effekte nicht realistisch. Für große  $x$  ist die Dynamik nur durch sehr wenige Kernspins dominiert, wodurch die Autokorrelation schrittweise in eine Oszillation übergeht. Dies ist ebenfalls unrealistisch für einen Quantenpunkt.

Hier wird nun  $x = 1$  und somit  $N = N_0$  gewählt, wodurch die kleinste Kopplung durch  $J_N = J_Q/e$  gegeben ist. Diese Wahl stellt einen guten Kompromiss dar, um auf der Zeitskala bis  $t_{\max}$ , bei der die Finite-Size-Effekte auftreten, eine Dynamik des Zentralspins zu erkennen, ohne dabei die Anzahl der einflussreichen Kernspins zu stark zu beschränken.

Abbildung 4.3 zeigt nun die exakte Zeitentwicklung mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichung (iEOM) für verschiedene Badgrößen  $N$  bis  $t = 35J_Q^{-1}$ . Dabei wird jeweils mit einer Simulation über den Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Formalismus (DMRG) [22] verglichen. Die Ergebnisse stimmen hier genau mit denen der iterierten Bewegungsgleichungen überein, wodurch bestätigt wird, dass die Metho-

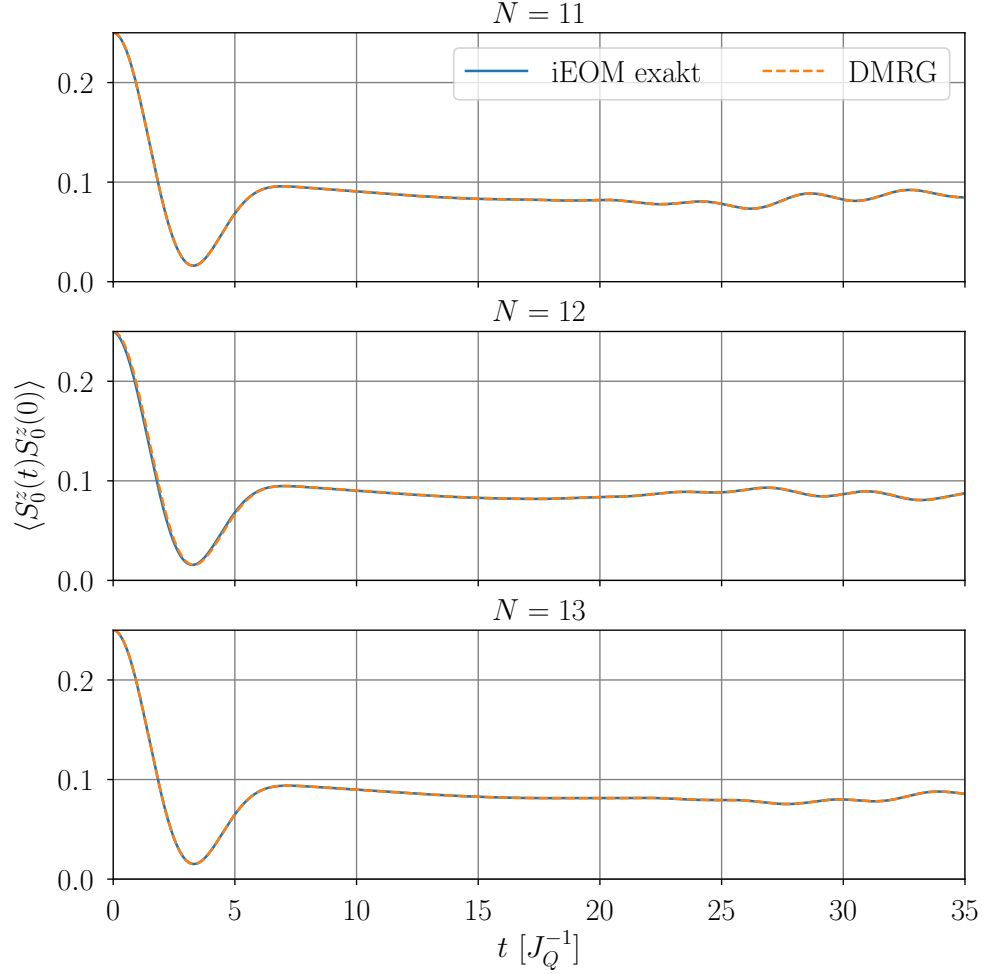


Abbildung 4.3: Exakte Lösung mit den iterierten Bewegungsgleichungen (iEOM) für  $x = 1$  im Vergleich mit einer Simulation über der Methode der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) für verschiedene Badgrößen  $N$ .

de korrekte Ergebnisse liefert. Dabei werden die Finite-Size-Effekte durch die leichten Oszillationen für größere Zeiten sichtbar. Für Ansteigende Badgrößen treten sie offensichtlich immer später in der Zeitentwicklung auf.

Die Umsetzung der iterierten Bewegungsgleichungen ist bei einer numerischen Berechnung relativ effizient in der Zeit, jedoch Speicherintensiv. Die Dauer für das hier größte exakt berechnete Bad von  $N = 13$  Spins liegt mit dem genutzten Programm bei etwa 24 Stunden. Der benötigte RAM-Speicher kann über die Skalierungsfunktionen (4.8) und (4.10) abgeschätzt werden. Da die Liouville-Matrix zu großen Teilen aus Nullen besteht, wird die Speicherung des Bewegungsgleichungssystems über eine dünn besetzte (sparse) Matrix umgesetzt. Diese speichert nicht jeden einzelnen Eintrag, sondern nur die von Null verschiedenen. Dazu sind zwei Long Integer mit jeweils 8 Byte

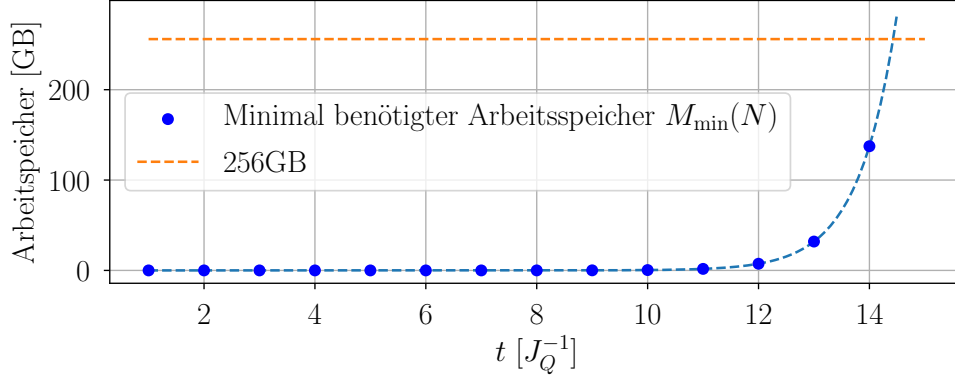


Abbildung 4.4: Minimal benötigter Arbeitsspeicher in Abhängigkeit der Badgröße  $N$  für eine exakte Berechnung mit der Autokorrelationsfunktion mit den iterierten Bewegungsgleichungen.

nötig um die Position des Eintrags zu bestimmen. Dessen Wert wird in einer Fließkommazahl mit doppelter Genauigkeit (Double) gespeichert welche ebenfalls 8 Byte groß ist. Dies liefert für die Matrix ein Speicheraufkommen von  $M_{\text{LM}}(N) = 24 \cdot S_{\text{LM}}$  Bytes. Da die Zeitentwicklung mit einem Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung durchgeführt wird, muss ebenfalls ein Vektor gespeichert werden. Dies wird über ein Array umgesetzt, wodurch für diesen Anteil  $M_{\text{B}}(N) = 8 \cdot S_{\text{B}}$  Bytes benötigt werden. Insgesamt gilt demnach

$$M_{\min}(N) = M_{\text{LM}}(N) + M_{\text{B}}(N) = 24 \cdot S_{\text{LM}} + 8 \cdot S_{\text{B}} \text{ Bytes} \quad (4.12)$$

Die Skalierung des Speicherbedarfs ist in Abbildung 4.4 zusammen mit dem für diese Arbeit maximal verfügbaren Speicher dargestellt. Offensichtlich steigt die benötigte Speichermenge rasant an. Es zeigt sich, dass die Anzahl der Kernspins hier auf maximal  $N = 14$  begrenzt ist. Dass in diesem Kapitel nur maximal  $N = 13$  Badspins betrachtet werden liegt daran, dass das verwendete Programm bezüglich des Speicherbedarfs nicht vollständig optimiert ist.

Nun wird das zuvor vorgestellte Trunkierungsschema angewendet um die Anzahl der zu lösenden Bewegungsgleichungen zu verringern.

### 4.3.2 Trunkierte Lösung

Da im vorigen Kapitel gezeigt wurde, dass die exakte Lösung der iterierten Bewegungsgleichungen mit denen etablierter Methoden übereinstimmen, werden nun diese zum Vergleich für die trunkierten Lösungen genutzt. In Abbildung 4.5 wird die maximale Platzzahl  $P_{\text{max}}$  für eine feste Anzahl Badspins  $N$  variiert. Der Vergleich zeigt, dass die gewählte Trunkierungsmethode nicht geeignet ist. Schon für  $P_{\text{max}} = N$  zeigen die Verläufe nach anfänglicher Übereinstimmung große Abweichungen. Ein Grund hierfür ist, dass bei dem genutzten Schema die Kopplungsstärke missachtet wird. Basisoperatoren, die  $P > P_{\text{max}}$  besetzte Plätze haben, koppeln nach (4.4) nicht zwangsläufig

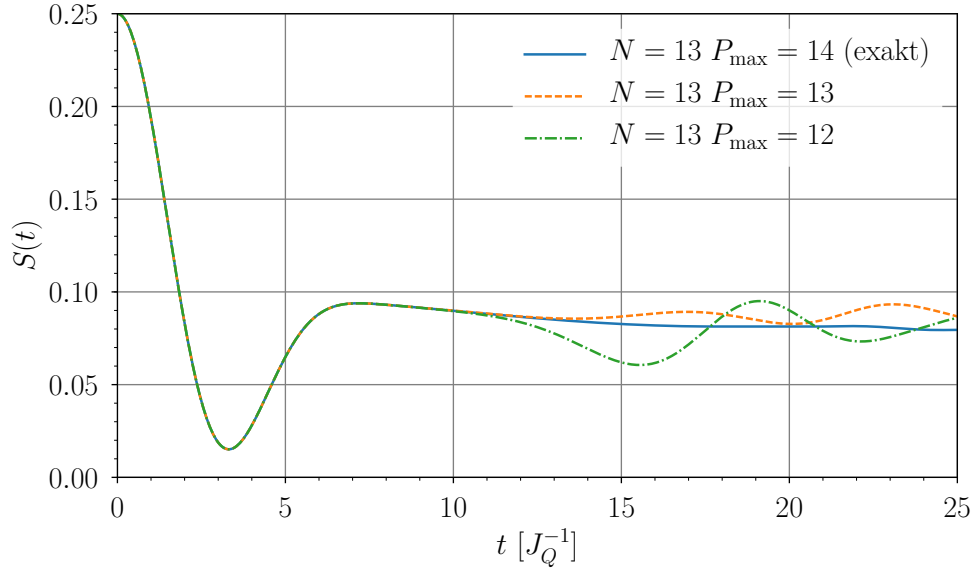


Abbildung 4.5: Vergleich einer exakten Lösung mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen mit zwei trunkierten Lösungen für verschiedenen Badgrößen  $N$ .

schwächer an den Zentralspin als jene, die aus  $P \leq P_{\max}$  Pauli-Matrizen bestehen. Aus diesem Grund ist die Relevanz der einzelnen Operatoren nicht an die Anzahl der beschreibenden Plätze gebunden. Eine Idee bei der Trunkierung ist weiterhin, dass die Anzahl der besetzten Plätze durch die Anzahl der Anwendungen des Hamiltonoperators gegeben ist. Dadurch, dass die Operatoren mit  $n$  besetzten Plätzen erst nach  $(n - 1)$  Iterationsschritten auftreten, wurde deren Einfluss auf das Kurzzeitverhalten des Zentralspins als sehr gering eingeschätzt. Jedoch akkumuliert sich der Einfluss offensichtlich so stark, dass signifikante Abweichungen entstehen.

Überlegungen zu neuen Trunkierungsschemata bieten voraussichtlich noch Optimierungsmöglichkeiten für den direkten Ansatz. Da die Skalierung der zu lösenden Bewegungsgleichungen in dieser Basis jedoch allgemein sehr schlecht ist, wird hier auf die Verbesserung der Trunkierung verzichtet. Eine bessere Möglichkeit die Größe des Problems signifikant zu verringern ist durch die Basisoperatoren selbst gegeben. Die im folgenden Kapitel vorgestellte Definition nutzt Näherungen für den Limes großer Bäder, wodurch auch realistische Badgrößen zugänglich werden, ohne dabei mehr Ressourcen zu benötigen als bisher.



## Kapitel 5

# Approximative Basisentwicklung für große Bäder

Die Struktur der neuen Basisoperatoren, welche in diesem Kapitel für die Zeitentwicklung des Zentralspins genutzt werden, basiert auf der Idee des Lanczos-Verfahrens in Ref. [25]. Dabei werden nicht wie zuvor die Spinoperatorprodukte direkt betrachtet, sondern Felder  $\hat{P}_j$  eingeführt. Diese sind, ähnlich zum Overhauserfeld, über eine gewichtete Summe über alle Badspins definiert. Für die Konstruktion der neuen Basisoperatoren bleibt der Zentralspinanteil im Vergleich zum direkten Ansatz unberührt, jedoch wird der Badanteil über Produkte aus den Komponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  der Felder beschrieben. Der Index  $j$  beschreibt dabei die Stufe der Kopplungsfaktoren, die durch orthogonale Polynome  $p_j(J_i)$  der Kopplungskonstanten  $J_i$  definiert sind. Diese Polynome werden über die Lanczos-Rekursion [26] bestimmt. Der Ansatz bietet den Vorteil, dass viele Badspin-Kombinationen, die beim direkten Ansatz in Kapitel 4 jeweils als eigenständige Basisoperatoren betrachtet wurden, nun in einem einzigen Basisoperator zusammengefasst werden. Dadurch wird die Größe des zu lösenden Differentialgleichungssystems signifikant reduziert. Um jedoch alle relevanten Wechselwirkungen zu erfassen, werden höhere Potenzen der  $\hat{P}_j^\alpha$  benötigt. Dabei wird die direkte Berechnung von Skalarprodukt und Erwartungswert schnell sehr aufwändig. Um einen einfacheren Zugang zu fast beliebigen Potenzen zu erhalten, wird im Laufe dieses Kapitels die Repräsentation des Badanteils der neuen Basisoperatoren durch normierte Hermitepolynome der Feldkomponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  motiviert.

### 5.1 Orthonormale Felder und Lanczos-Rekursion

Zunächst werden die Felder  $\hat{P}_j$  eingeführt. Diese sind über die gewichtete Summe

$$\hat{P}_j := \sum_{i=1}^N p_j(J_i) \hat{\sigma}_i \quad , \quad j \in \{1, 2, 3, \dots\} \quad (5.1)$$

mit den Polynomen  $p_j(J_i)$  in Abhängigkeit der Kopplungskonstanten  $J_i$  gegeben. Die Definition weicht um einen Faktor 2 vom klassischen Ansatz in Ref. [25] ab. Damit

diese Felder orthonormal sind, müssen die Polynome  $p_j$  orthonormal bezüglich des Skalarprodukts

$$(p_j|p_k) := \sum_{i=1}^N p_j(J_i)p_k(J_i) \stackrel{!}{=} \delta_{jk} \quad (5.2)$$

sein. Eine Polynombasis, die dies erfüllt, kann über den bekannten Lanczos-Algorithmus [26] bestimmt werden. Dazu wird zunächst das Startpolynom  $p_1(J_i) := J_i$  definiert. Die Idee des Algorithmus besteht grundsätzlich darin, das Startpolynom iterativ mit seinem Argument  $J_i$  zu multiplizieren und das entstehende Polynom  $\tilde{p}_{j+1}(J_i) = J_i p_j(J_i)$  mit dem Gram-Schmidt-Verfahren im Bezug auf alle vorherigen Polynome zu orthonormieren. Daraus ergibt sich die Rekursionsformel

$$J_i p_j(J_i) = \beta_j p_{j+1}(J_i) + \alpha_j p_j(J_i) + \beta_{j-1} p_{j-1}(J_i) \quad , \quad (5.3)$$

wobei  $p_0(J_i) := 0$  gilt. Die Faktoren  $\alpha_j$  und  $\beta_j$  sind die Lanczos-Koeffizienten, welche im Rahmen der Orthonormierung entstehen und durch

$$\beta_{j-1} = (\tilde{p}_{j+1}|p_{j-1}) \quad (5.4a)$$

$$\alpha_j := (\tilde{p}_{j+1}|p_j) \quad (5.4b)$$

$$\beta_j := \sqrt{|\tilde{p}_{j+1} - \alpha_j p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}|^2} \quad (5.4c)$$

gegeben sind. Für diese gilt  $\alpha_j, \beta_j \propto \sqrt{\gamma}$ . Die Rekursion kann somit ebenfalls über die tridiagonale Matrix

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0 & \dots \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \dots \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

und den Vektor der orthonormalen Polynome

$$\mathbf{p}(J_i) = (p_1(J_i), p_2(J_i), \dots, p_n(J_i))^T \quad (5.6)$$

durch

$$J_i \mathbf{p}(J_i) = \mathbf{T} \mathbf{p}(J_i) \quad (5.7)$$

dargestellt werden. Durch dieses Verfahren ergibt sich eine Basis  $\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_n\}$  aus reellen Polynomen, welche orthonormal bezüglich des Skalarprodukts (5.2) sind. Für die

orthonormalen Felder  $\hat{\mathbf{P}}_j$  gilt mit dem zuvor definierten Skalarprodukt (3.9) somit

$$\left(\hat{P}_j^\alpha \middle| \hat{P}_k^\beta\right) = \frac{1}{2^{N+1}} \text{Tr} \left( \sum_{n,m=1}^N p_j(J_n) p_k(J_m) \hat{\sigma}_n^\alpha \hat{\sigma}_m^\beta \right) \quad (5.8a)$$

$$= \frac{1}{2^{N+1}} \sum_{n,m=1}^N p_j(J_n) p_k(J_m) \text{Tr} \left( \hat{\sigma}_n^\alpha \hat{\sigma}_m^\beta \right) \quad (5.8b)$$

$$= \sum_{n=1}^N p_j(J_n) p_k(J_n) \delta_{\alpha\beta} \quad (5.8c)$$

$$= \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta} \quad . \quad (5.8d)$$

Im folgenden Kapitel wird nun die bereits erwähnte Einführung normierter Hermitepolynome motiviert, um einen einfachen Zugang auch für höhere Potenzen der Feldkomponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  zu erhalten.

## 5.2 Basisoperatoren mit Hermitepolynomen

Die Felder  $\hat{\mathbf{P}}_j$  bestehen aus gewichteten Summen von Spinoperatoren. Die Berechnung höherer Potenzen dieser Felder über das Skalarprodukt (3.9) ist wegen der Spur über die Spinoperatoren sehr aufwändig, da viele verschiedene Operator-Kontraktionen einen Beitrag liefern. Wie in Ref. [27] von Seifert *et al.* gezeigt kann dies jedoch stark vereinfacht werden, sobald eine große Anzahl Badspins betrachtet wird. Diese Voraussetzung ist hier für die orthonormalen Felder  $\hat{\mathbf{P}}_j$  gegeben, wenn ein System mit  $N_{\text{eff}} \rightarrow \infty$  repräsentiert wird. Dabei wurde in Kapitel 2 bereits festgestellt, dass die effektive Badspin-Anzahl  $N_{\text{eff}}$  wegen der exponentiellen Kopplungen für große Bäder über den Parameter  $\gamma$  bestimmt ist. Nach Seifert *et al.* ist nun der führende Beitrag in der effektiven Badgröße  $N_{\text{eff}}$  bei der Berechnung der Spur unter Annahme einer Gaußverteilung über alle paarweisen Kontraktionen der Spins gegeben. Dazu wird anhand eines einfachen Beispiels zunächst gezeigt, dass die Reihenfolge der orthonormalen Felder  $\hat{P}_j^\alpha$  bei der Auswertung der Spur in führender Ordnung irrelevant ist. Es gilt

$$\left[\hat{P}_1^\alpha, \hat{P}_1^\beta\right] = \sum_{i,j=1}^N p_1(J_i) p_1(J_j) \left[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta\right] \quad (5.9a)$$

$$= \alpha_1 \sum_{i=1}^N p_1(J_i) \left[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_i^\beta\right] + \beta_1 \sum_{i=1}^N p_2(J_i) \left[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_i^\beta\right] \quad (5.9b)$$

$$= \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left( \alpha_1 \hat{P}_1^\gamma + \beta_1 \hat{P}_2^\gamma \right) \quad (5.9c)$$

$$= \hat{I}^\gamma \quad . \quad (5.9d)$$

Wird nun das Skalarprodukt dieses Ergebnisses gebildet ergibt sich

$$\left(\hat{I}^\gamma \middle| \hat{I}^\gamma\right) = \alpha_1^2 \left(\hat{P}_1^\gamma \middle| \hat{P}_1^\gamma\right) + 2\alpha_1\beta_1 \left(\hat{P}_1^\gamma \middle| \hat{P}_2^\gamma\right) + \beta_1^2 \left(\hat{P}_2^\gamma \middle| \hat{P}_2^\gamma\right) \quad (5.10a)$$

$$= \alpha_1^2 + \beta_1^2 \quad (5.10b)$$

$$\propto \gamma \quad (5.10c)$$

$$\propto N_{\text{eff}}^{-1} \quad . \quad (5.10d)$$

Damit verschwindet der Kommutator für  $N_{\text{eff}} \rightarrow \infty$ . Weiterhin ist die Summe über  $N_{\text{eff}}$  nicht-verschwindende Spin-Kontraktionen proportional zu  $N_{\text{eff}}$ . Die führende Ordnung in  $N_{\text{eff}}$  ist somit über die Maximierung der Kontraktionen bestimmt. Bei einer großen Anzahl von Spinoperatoren ist diese Maximierung durch die Kontraktionen aller nicht-verschwindenden Paare gegeben. Weiterhin ist bekannt, dass der Erwartungswert von Produkten gaußverteilter Variablen ebenfalls durch die Berechnung aller paarweisen Kontraktionen gegeben ist [34, 35]. Diese Eigenschaften können nach Seifert *et al.* nun dazu genutzt werden, die Spur der Produkte aus den Feldkomponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  in führender Ordnung in  $N_{\text{eff}}$  über Gauß-Integrale zu bestimmen und damit sowohl das Skalarprodukt als auch den Erwartungswert des Badanteils der neuen Basisoperatoren zu berechnen.

Nun werden zunächst die normierten Hermitepolynome

$$H_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \tilde{H}_n(x) \quad (5.11)$$

eingeführt. Dabei sind die nicht-normierten Hermitepolynome durch

$$\tilde{H}_n(x) = (-1)^n e^{\frac{x}{2}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{x}{2}} \quad (5.12)$$

definiert [36]. Diese erfüllen die bekannten Relationen

$$\tilde{H}_{n+1}(x) = x\tilde{H}_n(x) - n\tilde{H}_{n-1} \quad , \quad (5.13a)$$

$$\frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) = n\tilde{H}_{n-1}(x) \quad . \quad (5.13b)$$

Dadurch folgt für die normierten Hermitepolynome direkt

$$xH_n(x) = \sqrt{n}H_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}H_{n+1}(x) \quad , \quad (5.14a)$$

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = \sqrt{n}H_{n-1}(x) \quad . \quad (5.14b)$$

Diese Relationen bieten einen einfachen Zugang zu höheren Potenzen des Arguments, was im Laufe dieses Kapitels für die orthonormalen Felder genutzt wird. Weiterhin gilt für die normierten Hermitepolynome die Orthonormalitätsbeziehung

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \delta_{nm} \quad . \quad (5.15)$$

bezüglich der Gewichtsfunktion  $w(x) = (\sqrt{2\pi})^{-1} \exp(-x^2/2)$ .

Nach Seifert *et al.* wird die Näherung für die Berechnung der Spur über Gauß-Integrale für  $N_{\text{eff}} \rightarrow \infty$  exakt. Das bedeutet, dass für die Hermitepolynome, welche nun als Argument einzelne Komponenten der orthonormalen Felder besitzen, die Relation

$$\left( H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \middle| H_{m_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \right) = \frac{1}{\dim \mathcal{H}} \text{Tr} \left( \left( H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \right)^\dagger H_{m_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \right) \quad (5.16a)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} H_{n_{j,\alpha}}(P_j^\alpha) H_{m_{j,\alpha}}(P_j^\alpha) e^{-\frac{1}{2}(P_j^\alpha)^2} dP_j^\alpha \quad (5.16b)$$

$$= \delta_{m_{j,\alpha} n_{j,\alpha}} \quad (5.16c)$$

gegeben ist und sie somit ebenfalls orthonormal bezüglich des Skalarproduktes (3.9) sind. Hier wird ausgenutzt, dass die Hermitepolynome der Feldkomponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  hermitesch sind. An dieser Stelle soll noch einmal betont werden, dass es sich um eine vollkommen quantenmechanische Betrachtung handelt, obwohl die Feldkomponenten  $P_j^\alpha$  in (5.16b) keine Operatoren mehr darstellen, sondern reelle Variablen. Es wird hier lediglich die führende Ordnung in  $N_{\text{eff}}$  der Spur von quantenmechanischen Spins über das Gaußintegral bestimmt. Im Fall  $N_{\text{eff}} < \infty$  ist diese Beziehung zwar nicht mehr exakt, stellt für große Bäder allerdings immer noch eine gute Approximation dar.

Nun können die neuen Basisoperatoren definiert werden. Da die Pauli-Matrizen des Badanteils über die Feldkomponenten  $\hat{P}_j^\alpha$  beschrieben sind, wird auf die Indizierung des Platzes vom Zentralspin verzichtet und dieser nur noch durch  $\hat{\sigma}_m$  mit  $m \in \{0,1,2,3\}$  dargestellt. Allgemein ist ein neuer Basisoperator mit der Kurzschreibweise  $H_{n_{j,\alpha}} := H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha)$  durch

$$\hat{b}_m^n := \hat{\sigma}_m \underbrace{H_{n_{1,x}} H_{n_{1,y}} H_{n_{1,z}} H_{n_{2,x}} \dots}_{=: A^n} = \sigma_m \prod_{j=1}^J \prod_{\alpha} H_{n_{j,\alpha}} \quad , \quad \alpha \in \{x, y, z\} \quad , \quad (5.17)$$

gegeben. Das  $J$ -Tupel  $\mathbf{n} = (n_{1,x}, n_{1,y}, \dots, n_{J,z})$  definiert dabei die Grade der Hermitepolynome im jeweiligen Basisoperator. Es sei hier noch einmal betont, dass deren Reihenfolge nach Seifert *et al.* in führender Ordnung in  $N_{\text{eff}}$  nicht relevant ist.

Dass die neuen Basisoperatoren  $\hat{b}_m^n$  orthonormal bezüglich des Skalarprodukts (3.9) sind, kann mit (5.16) gezeigt werden. Es gilt

$$\left( \hat{b}_k^n \middle| \hat{b}_l^m \right) = \frac{1}{\dim \mathcal{H}} \text{Tr} \left( \prod_{j=1}^J \prod_{\alpha} (\sigma_k H_{n_{j,\alpha}})^\dagger \sigma_l H_{m_{j,\alpha}} \right) \quad (5.18a)$$

$$= \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma_k \sigma_l) \frac{1}{2^N} \text{Tr} \left( \prod_{j=1}^J \prod_{\alpha} H_{n_{j,\alpha}} H_{m_{j,\alpha}} \right) \quad (5.18b)$$

$$= \delta_{kl} \delta_{\mathbf{n} \mathbf{m}} \quad . \quad (5.18c)$$

Die Grundvoraussetzungen für eine Basisentwicklung mit den iterierten Bewegungsgleichungen sind nun geschaffen. Im folgenden Kapitel wird diese zunächst allgemein betrachtet.

### 5.3 Allgemeine Basisentwicklung

Als initialer Basisoperator wird, wie zuvor, die  $z$ -Komponente des Zentralspins verwendet. Dies entspricht mit den neuen Basisoperatoren einem Operator mit den Quantenzahlen  $m = 3$  und  $n_{j,\alpha} = 0 \ \forall j, \alpha$ , sodass mit den Hermitepolynomen  $H_0(\hat{P}_j^\alpha) = \mathbb{1}$

$$\hat{\sigma}_0^z = \hat{\sigma}_3 H_0 H_0 H_0 \dots = \hat{\sigma}_3 \quad (5.19)$$

gilt. Die allgemeine Anwendung des Liouville-Operators  $\mathcal{L}$  (siehe Gleichung (3.1)) auf Basisoperatoren der Form (5.17) ergibt die Aufspaltung

$$\mathcal{L}\hat{\sigma}_m A^n = \underbrace{\mathcal{L}\hat{\sigma}_m}_{\text{(I)}} A^n + \hat{\sigma}_m \underbrace{\mathcal{L}A^n}_{\text{(II)}} \quad , \quad (5.20)$$

sodass die beiden Anteile (I) und (II) separat betrachtet werden können. Für Teil (I) ergibt sich

$$\mathcal{L}\hat{\sigma}_m = \begin{cases} 0 & \text{falls } m = 0 \\ \frac{iJ_Q}{2}\hat{\sigma}_{m+1}\hat{P}_1^{m-1} - \frac{iJ_Q}{2}\hat{\sigma}_{m-1}\hat{P}_1^{m+1} & \text{falls } m \in \{1, 2, 3\} \end{cases} \quad (5.21a)$$

$$\quad (5.21b)$$

wobei die Indizes in (5.21b) zyklisch zu verstehen sind und demnach auch für die neuen Indizes  $(m \pm 1) \in \{1, 2, 3\}$  gilt. Teil (II) lässt sich immer auf die Kommutation des Hamiltonoperators mit einem einzelnen Hermitepolynom, also Terme der Form

$$\mathcal{L}H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) = [\hat{H}, H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha)] \quad , \quad (5.22)$$

zurückführen. Um diese bestimmen zu können, wird zunächst der Liouville-Operator eines allgemeinen Feldes  $\hat{P}_j^\alpha$  bestimmt. Eine kurze Rechnung zeigt, dass mit (5.3) die Gleichung

$$\mathcal{L}\hat{P}_j^\alpha = -i \left\{ \hat{\mathbf{S}}_0 \times \left( \beta_j \hat{\mathbf{P}}_{j+1} + \alpha_j \hat{\mathbf{P}}_j + \beta_{j-1} \hat{\mathbf{P}}_{j-1} \right) \right\}_\alpha \quad (5.23)$$

mit den Lanczos-Koeffizienten  $\alpha_j$  und  $\beta_j$  gilt. Der Kommutator auf der rechten Seite in Gleichung (5.22) kann nun über die Relation

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = \frac{\partial f(\hat{B})}{\partial \hat{B}} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (5.24)$$

bestimmt werden. Die Ausnutzung dieser Beziehung ist hier nur im Fall großer Bäder sinnvoll, wie im Folgenden erläutert wird.

Die Gleichung (5.24) gilt nur, wenn auch die Beziehung

$$[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (5.25)$$

gegeben ist. Für die betrachteten Operatoren gilt dies im Allgemeinen jedoch nicht, was durch eine kurze Rechnung gezeigt werden soll. Wird für die allgemeinen Operatoren  $\hat{A} = \hat{H}$  und  $\hat{B} = \hat{P}_j^\alpha$  eingesetzt, so ergibt sich

$$\left[ \hat{P}_j^\alpha, \left[ \hat{H}, \hat{P}_j^\alpha \right] \right] = \left[ \hat{P}_j^\alpha, -i \left\{ \hat{S}_0 \times \left( \beta_j \hat{P}_{j+1} + \alpha_j \hat{P}_j + \beta_{j-1} \hat{P}_{j-1} \right) \right\}_\alpha \right] \quad (5.26a)$$

$$= -i \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_0^\beta \left( \beta_j \left[ \hat{P}_j^\alpha, \hat{P}_{j+1}^\gamma \right] + \alpha_j \left[ \hat{P}_j^\alpha, \hat{P}_j^\gamma \right] + \beta_{j-1} \left[ \hat{P}_j^\alpha, \hat{P}_{j-1}^\gamma \right] \right) \quad (5.26b)$$

Diese Gleichung verschwindet nur genau dann, wenn alle Kommutatoren der Komponenten  $\alpha$  der Felder  $\hat{P}_{j(\pm 1)}$  verschwinden. Das ist offensichtlich nicht der Fall, da ebenfalls die Dynamik des Badanteils aus der Heisenberg-Gleichung wegen

$$\hat{H} = \sum_\alpha \hat{S}_0^\alpha \sum_{i=1}^N J_i \hat{S}_i^\alpha = \frac{1}{2} \sum_\alpha \hat{S}_0^\alpha \hat{P}_1^\alpha \quad (5.27)$$

durch diese Art von Kommutatoren gegeben ist.

Wie in (5.10) gezeigt, ist für große effektive Bäder  $N_{\text{eff}}$ , und somit kleine  $\gamma$ , die Reihenfolge der Felder für die führende Ordnung in  $N_{\text{eff}}$ , beziehungsweise der Kopplungsstärke  $\gamma$ , bei der Auswertung der Spur nicht relevant. Die Dynamik des Systems ist in führender Ordnung proportional zu Termen der Größenordnung  $\mathcal{O}(\sqrt{\gamma})$ . Jede weitere Kommutation zweier Komponenten der orthonormalen Felder erzeugt nun einen zusätzlichen Term proportional zu  $\mathcal{O}(\sqrt{\gamma})$ . Die entstehenden Korrekturterme der Form (5.26b) sind damit von der Größenordnung  $\mathcal{O}(\gamma^{\frac{3}{2}})$ . Da diese Terme nicht mehr führender Ordnung sind, werden sie bei der Auswertung der Spur über Gaußkorrelationen vernachlässigt, wodurch die Ausnutzung der Relation (5.24) motiviert ist.

Unter Benutzung von (5.23) und (5.24) kann demnach die Kommutation (5.22) von Hamiltonoperator und Hermitepolynom zu

$$\left[ \hat{H}, H_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \right] = -i H'_{n_{j,\alpha}}(\hat{P}_j^\alpha) \left\{ \hat{S}_0 \times \left( \beta_j \hat{P}_{j+1} + \alpha_j \hat{P}_j + \beta_{j-1} \hat{P}_{j-1} \right) \right\}_\alpha \quad (5.28a)$$

$$= -i \sqrt{n_{j,\alpha}} H_{n_{j,\alpha}-1}(\hat{P}_j^\alpha) \left\{ \hat{S}_0 \times \left( \beta_j \hat{P}_{j+1} + \alpha_j \hat{P}_j + \beta_{j-1} \hat{P}_{j-1} \right) \right\}_\alpha \quad (5.28b)$$

bestimmt werden.

Um nun die Bewegungsgleichung eines Basisoperators in voller Allgemeinheit darzustellen, werden die Hermitepolynome  $H_{n_{j,\alpha}}$  links und rechts des Kommutators (5.28) in die Feldanteile

$$A_{\alpha,j}^{n,l} = \prod_{k=1}^{j-1} \prod_{\beta=1}^3 H_{n_{k,\beta}} \prod_{\gamma=1}^{\alpha-1} H_{n_{j,\gamma}} \quad (5.29a)$$

$$A_{\alpha,j}^{n,r} = \prod_{\gamma=\alpha+1}^3 H_{n_{j,\gamma}} \prod_{k=j+1}^J \prod_{\beta=1}^3 H_{n_{k,\beta}} \quad (5.29b)$$

aufgeteilt. Mit dieser Formulierung ist die Heisenberg-Bewegungsgleichung für einen allgemeinen Basisoperator durch

$$\frac{d}{dt}(\hat{\sigma}_m A^n) = \frac{J_Q}{2} \left( \hat{\sigma}_{m-1} \hat{P}_1^{m+1} - \hat{\sigma}_{m+1} \hat{P}_1^{m-1} \right) A^n \quad (5.30a)$$

$$+ \hat{\sigma}_m \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha} A_{\alpha,j}^{n,l} \sqrt{n_{j,\alpha}} H_{n_{j,\alpha}-1} \left\{ \hat{S}_0 \times \left( \beta_j \hat{P}_{j+1} + \alpha_j \hat{P}_j + \beta_{j-1} \hat{P}_{j-1} \right) \right\}_{\alpha} A_{\alpha,j}^{n,r} \quad (5.30b)$$

gegeben. Da die Reihenfolge der Operator-Felder  $\hat{P}_j$ , wie zuvor motiviert, in führender Ordnung in  $\gamma$  irrelevant ist, kann dies weiter zu

$$\frac{d}{dt}(\hat{\sigma}_m A^n) = \frac{J_Q}{2} \left( \hat{\sigma}_{m-1} \hat{P}_1^{m+1} - \hat{\sigma}_{m+1} \hat{P}_1^{m-1} \right) A^n \quad (5.30c)$$

$$+ \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sqrt{n_{j,\alpha}} \hat{\sigma}_m \frac{\hat{\sigma}_{\beta}}{2} \left( \beta_j \hat{P}_{j+1}^{\gamma} + \alpha_j \hat{P}_j^{\gamma} + \beta_{j-1} \hat{P}_{j-1}^{\gamma} \right) (A_{\alpha,j}^n)' \quad (5.30d)$$

umgeformt werden. Dabei stellt

$$(A_{\alpha,j}^n)' = A_{\alpha,j}^{n,l} \cdot H_{n_{j,\alpha}-1} \cdot A_{\alpha,j}^{n,r} \quad (5.31)$$

den modifizierten Feldanteil des Basisoperators dar, welcher das um eine Stufe dekrementierte Hermitepolynom  $H_{n_{j,\alpha}-1}$  enthält.

Diese Ergebnisse werden nun genutzt, um die Basisoperatoren in einem Zustandsraum darzustellen, auf die ein effektiver Hamiltonoperator wirkt, der die Prozesse des Badanteils durch bosonische Leiter-Operatoren beschreibt.

## 5.4 Übergang zu bosonischen Leiteroperatoren

Eine neue Darstellung in bosonischen Leiteroperatoren liefert eine kompaktere Schreibweise und einen einfacheren Zugang zur Basis-Entwicklung als die Kommutation bei der Anwendung des Liouville-Operators. Dabei werden nun die Basisoperatoren  $\hat{b}_m^n$  als Basiszustände in der Dirac-Notation durch

$$|b_m^n\rangle = |m; \mathbf{n}\rangle = |m; n_{1,x} n_{1,y} n_{1,z}, n_{2,x} \dots\rangle \quad (5.32)$$

formuliert. Da die Hermitepolynome in (5.30) mit den  $\hat{P}_j^{\alpha}$  vertauschen, entspricht die Anwendung des Liouville-Superoperators auf einen Basisoperator in der neuen Zustandsnotation der Anwendung eines effektiven Hamiltonoperators auf den äquivalenten Zustand. Damit ist die Bewegungsgleichung in dieser Darstellung prinzipiell durch

$$\frac{d}{dt} |m; n_{1,x} n_{1,y} n_{1,z}; n_{2,x} \dots\rangle = i \hat{H}_{\text{eff}} |m; n_{1,x} n_{1,y} n_{1,z}; n_{2,x} \dots\rangle \quad (5.33)$$

beschrieben.

Es werden nun zunächst die Leiteroperatoren für Hermitepolynome eingeführt und gezeigt, dass sie die Prozesse des Badanteils äquivalent zur Darstellung im Spinraum beschreiben.

### 5.4.1 Leiteroperatoren der Hermitepolynome

Für den Erzeugungsoperator  $\hat{a}^\dagger$  sowie den Vernichtungsoperator  $\hat{a}$  für den Badanteil der neuen Basiszustände gelten die Definitionen

$$\hat{a} := \frac{\hat{x}}{2} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \quad , \quad (5.34a)$$

$$\hat{a}^\dagger := \frac{\hat{x}}{2} - \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \quad . \quad (5.34b)$$

Für eine kürzere Schreibweise wird hier zunächst ein allgemeines  $\hat{x}$  betrachtet, das später durch  $\hat{P}_j^\alpha$  ersetzt wird. Weiterhin ist die Kommutation der Erzeuger und Vernichter durch

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad , \quad (5.35a)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (5.35b)$$

gegeben. Damit die Prozesse im physikalischen Spinraum sinnvoll auf den Zustandsraum übertragen werden können, muss ein Zustand definiert werden, der für die Leiteroperatoren die Relationen

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad , \quad (5.36a)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad . \quad (5.36b)$$

erfüllt. Wie eine kurze Rechnung zeigt (siehe Appendix A.1), wird dies durch die Zustände mit der Äquivalenzbeziehung

$$|n\rangle \hat{=} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (5.37)$$

erfüllt. Um einen effektiven Hamiltonoperator in den bosonischen Leiteroperatoren darstellen zu können sind die Ausdrücke für das Argument  $\hat{x}$ , sowie für die Ableitung der Hermitepolynome im Zustandsraum essentiell. Für diese gilt offensichtlich

$$\hat{x} = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad , \quad (5.38a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} = \frac{1}{2}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad . \quad (5.38b)$$

Bekanntermaßen sind mit diesen Definitionen die Darstellung mit bosonischen Leiteroperatoren äquivalent zur Darstellung im Raum der Variable  $x$  ist. Es gilt

$$\hat{x} |n\rangle = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) |n\rangle \quad (5.39a)$$

$$= \sqrt{n} |n-1\rangle + \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad . \quad (5.39b)$$

Wird nun diese Gleichung im Raum von  $x$  betrachtet, so gilt

$$x H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} = \sqrt{n} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} + \sqrt{n+1} H_{n+1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (5.39c)$$

$$\Leftrightarrow x H_n(x) = \sqrt{n} H_{n-1}(x) + \sqrt{n+1} H_{n+1}(x) \quad . \quad (5.39d)$$

Damit ist die Multiplikation mit dem Argument äquivalent. Für die partielle Ableitung wird gleichermaßen vorgegangen. Es ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} |n\rangle = \frac{1}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) |n\rangle \quad (5.40a)$$

$$= \frac{\sqrt{n}}{2} |n-1\rangle - \frac{\sqrt{n+1}}{2} |n+1\rangle \quad . \quad (5.40b)$$

Im physikalischen Raum gilt nun mit der bekannten Rekursion (5.13a) wiederum

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \right) = \frac{\sqrt{n}}{2} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} - \frac{\sqrt{n+1}}{2} H_{n+1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (5.40c)$$

$$\Leftrightarrow H'_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} = \left( \frac{x}{2} H_n(x) + \frac{\sqrt{n}}{2} H_{n-1}(x) - \frac{\sqrt{n+1}}{2} H_{n+1}(x) \right) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (5.40d)$$

$$\Leftrightarrow H'_n(x) = \sqrt{n} H_{n-1}(x) \quad . \quad (5.40e)$$

Demnach ist ebenfalls die Ableitung nach dem Argument der Hermitepolynome in beiden Darstellungen äquivalent.

Mit den Relationen (5.38a) und (5.38b) des Arguments und der Ableitung der Hermitepolynome im Zustandsraum ist es somit möglich, die Prozesse des Badspinanteils der Bewegungsgleichungen durch einen effektiven Hamiltonoperator zu beschreiben. Ein Basiszustand  $|b_m^n\rangle$  stellt nun beliebig viele Hermitepolynome dar. Deswegen werden die Leiteroperatoren  $\hat{a}_{j,\alpha}$  beziehungsweise  $\hat{a}_{j,\alpha}^\dagger$  definiert, die nur auf die Quantenzahl  $n_{j,\alpha}$  des Zustands wirken. Es müssen nun noch neue Operatoren definiert werden, welche die Wirkung des Liouville-Operators auf den Zentralspinanteil im Spinraum im neuen Zustandsraum beschreiben.

## 5.4.2 Zentralspin-Matrizen des Hamiltonoperators

Die für den Zentralspin relevanten Operationen bei der Berechnung der Bewegungsgleichungen sind die Multiplikation und die Kommutation zweier Pauli-Matrizen. Für eine kürzere Schreibweise sind die Zustände, welche die Basisoperatoren repräsentieren, auf den Zentralspinanteil reduziert. Dieser wird in diesem Kapitel mit  $|m\rangle \Leftrightarrow \sigma_m$ ,  $m \in \{0,1,2,3\}$ , bezeichnet.

### 5.4.2.1 Multiplikation

Es wird nun zunächst der Multiplikationsoperatoren  $\hat{M}_m$  eingeführt. Da die Pauli-Matrizen nicht kommutieren, ist die Reihenfolge der Multiplikation von Bedeutung, weshalb hier die Äquivalenzbeziehung zwischen den Darstellungen durch

$$\hat{M}_k |m\rangle \Leftrightarrow \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_m \quad (5.41)$$

definiert wird. Allgemein sind die Matrixelemente des Multiplikationsoperators somit durch

$$\langle n | \hat{M}_k | m \rangle := \begin{cases} \delta_{mk} & \text{falls } n = 0 \\ \delta_{nk} & \text{falls } m = 0 \\ i\epsilon_{nkm} & \text{falls } m, n \neq 0 \end{cases} \quad k \in \{1, 2, 3\} \quad (5.42)$$

gegeben. Diese Definition liefert nun die hermiteschen Multiplikationsoperatoren in Matrixdarstellung, welche durch

$$\hat{M}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.43a)$$

$$\hat{M}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.43b)$$

$$\hat{M}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.43c)$$

gegeben sind.

#### 5.4.2.2 Kommutation

Das Vorgehen für die Multiplikation wird nun ebenfalls für die Kommutation zweier Pauli-Matrizen durchgeführt. Die Wirkung des Kommutationsoperators ist hier über die Äquivalenzbeziehung

$$\hat{K}_k |m\rangle \Leftrightarrow [\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_m] \quad (5.44)$$

gegeben. Dies liefert für die Matrixelemente die Definition

$$\langle n | \hat{K}_k | m \rangle := \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 0 \vee m = 0 \\ 2i\epsilon_{nkm} & \text{falls } m, n \neq 0 \end{cases} \quad k \in \{1, 2, 3\} \quad (5.45)$$

Damit lassen sich die Matrizen des Kommutationsoperators durch

$$\hat{K}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i \\ 0 & 0 & -2i & 0 \end{pmatrix} \quad (5.46a)$$

$$\hat{K}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.46b)$$

$$\hat{K}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2i & 0 \\ 0 & -2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.46c)$$

darstellen.

Mithilfe der neu definierten Operatoren für Multiplikation und Kommutation sowie der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der Hermitepolynome wird nun der effektive Hamiltonoperator  $\hat{H}_{\text{eff}}$  hergeleitet.

### 5.4.3 Effektiver Hamiltonoperator

Der Ausgangspunkt für die neue Darstellung sind die Ergebnisse der Anwendung des Liouville-Operators auf einen allgemeinen Zentralspin (Gleichungen (5.21a) und (5.21b)), sowie auf ein allgemeines Hermitepolynom (Gleichung (5.28b)). Damit lässt sich der effektive Hamiltonoperator nach

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{ZS}} + \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} \quad (5.47)$$

aufteilen in den Zentralspinanteil  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{ZS}}$  und den Feldanteil  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}}$ . Diese sind durch

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{ZS}} = \frac{JQ}{4} \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \left( a_{1,\alpha} + a_{1,\alpha}^{\dagger} \right) \quad (5.48a)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{4} \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( a_{j,\alpha} - a_{j,\alpha}^{\dagger} \right) \quad (5.48b)$$

$$\cdot \left\{ \alpha_j \left( a_{j,\gamma} + a_{j,\gamma}^{\dagger} \right) + \beta_{j-1} \left( a_{j-1,\gamma} + a_{j-1,\gamma}^{\dagger} \right) + \beta_j \left( a_{j+1,\gamma} + a_{j+1,\gamma}^{\dagger} \right) \right\} \quad (5.48c)$$

gegeben. Anschaulich betrachtet erzeugt der Zentralspinanteil zum Einen neue Bosonen, welche in das Bad gegeben werden, zum Anderen vernichtet er im Bad vorhandene Bosonen. Der Feldanteil beschreibt die Bosonen-Bewegung im Bad, verändert die Teilchenzahl jedoch nicht, wie sich im Folgenden zeigen wird. Abbildung 5.1 stellt die Prozesse bei der Anwendung auf einen Zustand schematisch dar.

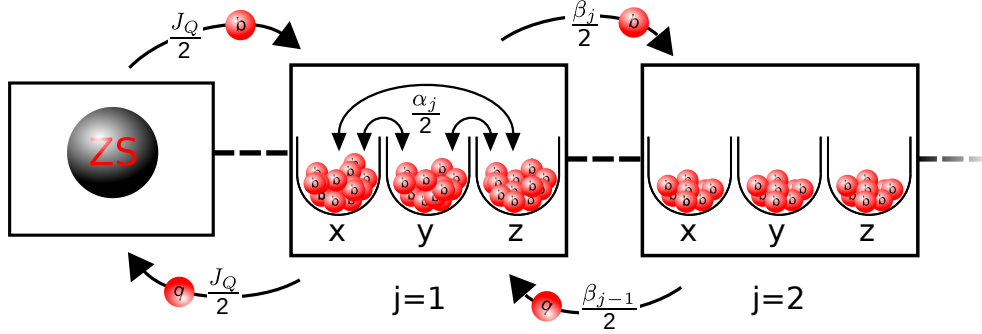


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Prozesse, die der effektive Hamiltonoperator beschreibt. Dazu zählen Erzeugung und Vernichtung von Bosonen durch den Zentralspin, sowie die Hüpfprozesse innerhalb eines Feldes und zwischen den Feldern.

Die Hüpfvorgänge im Bad werden deutlich, wenn der Anteil  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}}$  umgeformt wird. Zu Beginn müssen dazu die Klammern in den Gleichungen (5.48b) und (5.48c) aufgelöst werden, sodass der bilineare Term

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{4} \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left\{ \alpha_j \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j,\gamma} + \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j,\gamma} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j,\gamma}^{\dagger} \right) \right. \quad (5.49a)$$

$$+ \beta_{j-1} \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j-1,\gamma} + \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j-1,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j-1,\gamma} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j-1,\gamma}^{\dagger} \right) \quad (5.49b)$$

$$\left. + \beta_j \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma} + \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j+1,\gamma} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j+1,\gamma}^{\dagger} \right) \right\} \quad (5.49c)$$

entsteht. Wegen der Antisymmetrie des  $\epsilon$ -Tensors verschwinden die rein erzeugenden und vernichtenden Terme mit gleichem Index  $j$ . Es können mit der selben Begründung ebenfalls alle weiteren Terme, die nur aus Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperatoren bestehen, jedoch ungleiche Indizes  $j$  besitzen, eliminiert werden. Dazu ist eine Betrachtung der Vernichtungsoperatoren ausreichend, da das Vorgehen für die Erzeugungsoperatoren äquivalent ist. Mit den Definitionen  $\beta_0 = \beta_J := 0$  gilt

$$\sum_{j=1}^J \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} (\beta_{j-1} \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j-1,\gamma} + \beta_j \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma}) \quad (5.50a)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \sum_{j=1}^{J-1} \beta_j \underbrace{(-\hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma} + \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma})}_{=0} \quad (5.50b)$$

$$= 0 \quad . \quad (5.50c)$$

Damit wird der Badanteil des effektiven Hamiltonoperators auf sogenannte Hüpfsterme reduziert, wobei die Terme mit den Lanczos-Koeffizienten  $\alpha_j$  ein Hüpfen der Bosonen zwischen den Komponenten eines orthonormalen Feldes  $\hat{P}_j^{\alpha}$  und die Terme mit den Koeffizienten  $\beta_j$  ein Hüpfen zwischen den Feldern selbst beschreiben. Der Badanteil ist

somit durch

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{4} \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left\{ \alpha_j \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j,\gamma} \right) \right. \quad (5.51a)$$

$$\left. + \beta_{j-1} \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j-1,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j-1,\gamma} \right) + \beta_j \left( \hat{a}_{j,\alpha} \hat{a}_{j+1,\gamma}^{\dagger} - \hat{a}_{j,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{j+1,\gamma} \right) \right\} \quad (5.51b)$$

gegeben. Dies kann in eine kompakte Matrix-Vektor-Schreibweise überführt werden, indem die tridiagonale Matrix der Lanczos-Koeffizienten  $\mathbf{T}$  aus Gleichung (5.5), sowie die Leiteroperator-Vektoren

$$\hat{\mathbf{a}}_{\alpha} = \left( \hat{a}_{1,\alpha}, \hat{a}_{2,\alpha}, \dots, \hat{a}_{L,\alpha} \right)^{\text{T}}, \quad (5.52a)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_{\alpha}^{\dagger} = \left( \hat{a}_{1,\alpha}^{\dagger}, \hat{a}_{2,\alpha}^{\dagger}, \dots, \hat{a}_{L,\alpha}^{\dagger} \right) \quad (5.52b)$$

genutzt werden. Da die Leiteroperatoren vertauschen, sobald sie nicht auf dasselbe Hermitepolynom wirken, gilt

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{4} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( \hat{\mathbf{a}}_{\gamma}^{\dagger} \mathbf{T} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} - \hat{\mathbf{a}}_{\alpha}^{\dagger} \mathbf{T} \hat{\mathbf{a}}_{\gamma} \right) . \quad (5.53a)$$

Wird nun ein weiteres Mal die Antisymmetrie des  $\epsilon$ -Tensors genutzt, so kann dieser Ausdruck noch über Vertauschung der Indizes zu

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( \hat{\mathbf{a}}_{\gamma}^{\dagger} \mathbf{T} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} \right) \quad (5.53b)$$

zusammengefasst werden. Dieser Term verdeutlicht nun die Hüpfprozesse des Badan-teils, welche in Abbildung 5.1 dargestellt sind.

Da  $\mathbf{T}$  eine reelle, symmetrische Tridiagonal-Matrix ist, gilt für sie  $\mathbf{T}\mathbf{T}^{\text{T}} = \mathbf{T}^{\text{T}}\mathbf{T}$ , sodass sie normal und somit diagonalisierbar ist. Dies bedeutet, dass es eine unitäre Matrix  $\mathbf{Q}$  gibt, für die

$$\mathbf{D} = \mathbf{Q}^{\dagger} \mathbf{T} \mathbf{Q} \quad (5.54)$$

gilt, wobei  $\mathbf{D}$  eine Diagonalmatrix ist. Damit kann  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}}$  weiter umgeformt werden zu

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( \hat{\mathbf{a}}_{\gamma}^{\dagger} \mathbf{Q} \underbrace{\mathbf{Q}^{\dagger} \mathbf{T} \mathbf{Q}}_{\mathbf{D}} \mathbf{Q}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} \right) \quad (5.55a)$$

$$= \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( \hat{\mathbf{a}}_{\gamma}^{\dagger} \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} \right) . \quad (5.55b)$$

Um die Transformation in die diagonale Darstellung ebenfalls auf die Leiteroperatoren anzuwenden, werden die neuen Leiteroperator-Vektoren

$$\hat{\alpha}_{\alpha} := \mathbf{Q}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\alpha} , \quad (5.56a)$$

$$\hat{\alpha}_{\alpha}^{\dagger} := \hat{\mathbf{a}}_{\alpha}^{\dagger} \mathbf{Q} \quad (5.56b)$$

definiert. Hiermit ergibt sich für den Feldanteil, mit den Eigenwerten  $\lambda_j$  der Diagonalmatrix  $\mathbf{D}$ , der Ausdruck

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{F}} = \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \left( \hat{\alpha}_{\gamma}^{\dagger} \mathbf{D} \hat{\alpha}_{\alpha} \right) = \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \sum_{j=1}^J \lambda_j \left( \hat{\alpha}_{j,\gamma}^{\dagger} \hat{\alpha}_{j,\alpha} \right) \quad , \quad (5.57)$$

sodass für den vollständigen Hamiltonoperator abschließend

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{J_Q}{4} \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \left( Q_{1,j} \hat{\alpha}_{j,\alpha} + \hat{\alpha}_{j,\alpha}^{\dagger} Q_{j,1}^{\dagger} \right) + \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{M}_{\beta} \sum_{j=1}^J \lambda_j \left( \hat{\alpha}_{j,\gamma}^{\dagger} \hat{\alpha}_{j,\alpha} \right) \quad (5.58)$$

gilt.

Wird nun noch ein Magnetfeld der Stärke  $h$  angelegt, welches nur an den Zentralspin koppelt und in die Richtung einer allgemeinen Komponente  $\alpha \in \{x, y, z\}$  zeigt, so entsteht wegen des zusätzlichen Terms

$$\hat{H}_{\text{M}}^{\alpha}(h) = -h \hat{S}_0^{\alpha} = -\frac{h}{2} \hat{\sigma}_0^{\alpha} \quad (5.59)$$

aus dem Hamiltonoperator (2.3) lediglich eine weitere Zentralspin-Kommutation. Dies liefert für den gesamten effektiven Hamiltonoperator mit Magnetfeld den Ausdruck

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\alpha}(h) = \hat{H}_{\text{eff}}^0 + \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{M},\alpha}(h) = \hat{H}_{\text{eff}}^0 - \frac{h}{2} \hat{K}_{\alpha} \quad . \quad (5.60)$$

Hier beschreibt  $\hat{H}_{\text{eff}}^0$  den Ausdruck (5.58) ohne Magnetfeld.

#### 5.4.4 Konsistenz der Approximation

Werden diese Ergebnisse nun für die Anwendung der iterierten Bewegungsgleichungen genutzt, so weichen die Resultate schon auf relativ kurzen Zeitskalen stark von denen etablierter Methoden wie der DMRG ab, wie in Abbildung 5.2 dargestellt ist. Im folgenden wird diese Problematik analysiert und ein Lösungsansatz entwickelt.

Die in dieser Arbeit betrachtete Autokorrelationsfunktion (2.12) der  $z$ -Komponente des Zentralspins ist wegen der Eigenschaft

$$\left\langle \left( \hat{S}_0^z(t) \hat{S}_0^z(0) \right)^{\dagger} \right\rangle = \left\langle \hat{S}_0^z(t) \hat{S}_0^z(0) \right\rangle \quad (5.61)$$

eine reelle Größe. Wird nun der Hamiltonoperator (5.60) für die Basis-Entwicklung genutzt, entstehen bei der Lösung des Bewegungsgleichungssystems für  $t > 0$  dennoch imaginäre Anteile, welche die Verfälschung der Berechnung der Autokorrelationsfunktion in Abbildung 5.2 für  $h = 0$  verursachen. Da diese Anteile mathematisch nicht erlaubt und physikalisch nicht sinnvoll sind, muss hier ein Konstruktionsproblem vorliegen.

Die Ursache dieses Problems ist dadurch begründet, dass die Wechselwirkung nur in führender Ordnung in  $\gamma$  betrachtet wird. Dadurch ist die Reihenfolge der unkorrelierten

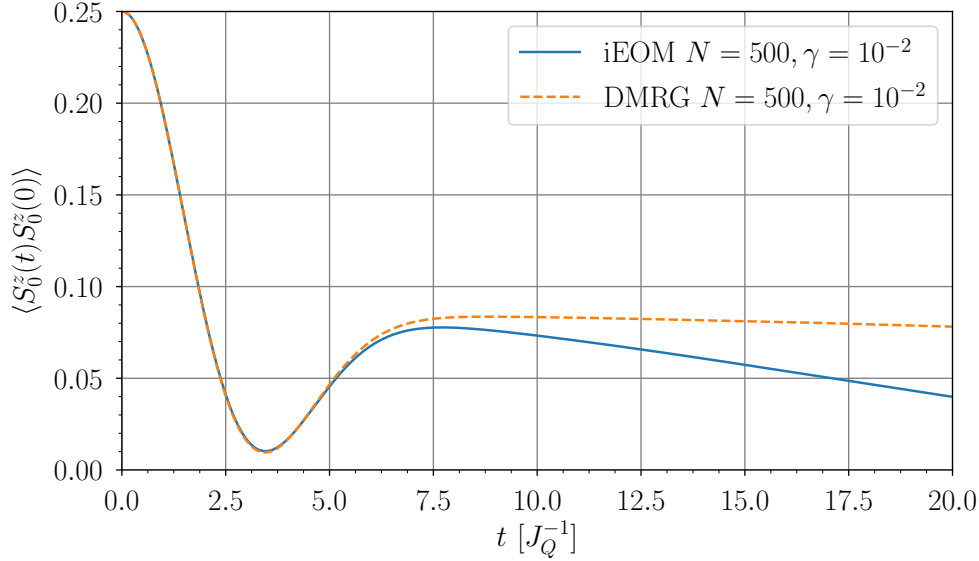


Abbildung 5.2: Kurvenverlauf der Autokorrelationsfunktion mit der Methode der DMRG und die verfälschte Berechnung mit den iterierten Bewegungsgleichungen ohne Magnetfeld im Vergleich.

Felder  $\hat{P}_j^\alpha$  nach der dynamik-gebenden Kommutation irrelevant, während die Reihenfolge der Zentralspinoperatoren weiterhin von Bedeutung bleibt. Diese inkonsistente Betrachtung der beiden Anteile verursacht, dass einige Koeffizienten von Basisoperatoren nicht verschwinden, die sich ohne Approximation durch die vernachlässigten Terme kompensieren würden. Die Relevanz der Reihenfolge der Zentralspinoperatoren wird durch den Multiplikationsoperator (5.42) gesteuert, weshalb dieser auch den Imaginärteil in der Autokorrelation für  $t > 0$  erzeugt. Das wird deutlich, wenn die direkte Zeitentwicklung

$$\langle 3 | \hat{U} | 3 \rangle = \langle 3 | e^{i\hat{H}_{\text{eff}}t} | 3 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} \langle 3 | \hat{H}_{\text{eff}}^n | 3 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} C_n \quad (5.62)$$

betrachtet wird. Offensichtlich darf auch diese mathematisch keinen Imaginärteil besitzen, wodurch  $C_{2k+1} = 0$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$  gelten muss. Die Berechnung der ersten Koeffizienten  $C_n$  (siehe Appendix A.2.3) zeigt jedoch, dass bereits  $C_3$  einen nicht-verschwindenden Wert in der direkten Zeitentwicklung verursacht. Dies entspricht offensichtlich dem dritten Iterationsschritt bei den iterierten Bewegungsgleichungen. Bei genauerer Betrachtung wird klar, dass die nicht-verschwindenden Terme durch den Imaginärteil des Multiplikationsoperators entstehen, welcher die Relevanz der Reihenfolge des Zentralspinanteils über den  $\epsilon$ -Tensor bedingt. Um die Approximation für die Felder  $\hat{P}_j^\alpha$  dennoch beibehalten zu können, besteht der Lösungsansatz in dieser Arbeit nun darin, den Imaginärteil des Multiplikationsoperators ebenfalls zu vernachlässigen.

Die Begründung hierfür kann in der Eigenschaft der Antihermitizität des Kommu-

tators für hermitesche Operatoren gefunden werden. Ein allgemeiner Basisoperator ist durch  $\hat{b}_m^n = \hat{\sigma}_m A^n$  gegeben. Da die Reihenfolge der Felder in führender Ordnung im Badanteil als irrelevant angesehen wird, ist  $A^n$  und somit auch  $\hat{b}_m^n$  hermitesch. Da die Anwendung des Liouville-Superoperators einer Kommutation entspricht, muss in der betrachteten Näherung

$$\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A^n) = -(\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A^n))^\dagger \quad (5.63)$$

gelten. Wird nun die Anwendung des Liouville-Operators auf einen allgemeinen Basisoperator durchgeführt, wie in Gleichung (5.20), so ergibt sich durch zusätzliche Aufspaltung des Hamiltonoperators

$$\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A^n) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left( [\hat{S}_0^\alpha, \hat{\sigma}_m] \hat{P}_1^\alpha A^n + \hat{\sigma}_m \hat{S}_0^\alpha [\hat{P}_1^\alpha, A^n] \right) \quad (5.64a)$$

Wegen der Hermitizität der einzelnen Operatoren und der Antihermitizität der Kommutatoren gilt für den kommutierten Liouville-Operator

$$(\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A^n))^\dagger = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left( [\hat{S}_0^\alpha, \hat{\sigma}_m] A \hat{P}_1^\alpha + \hat{S}_0^\alpha \hat{\sigma}_m [\hat{P}_1^\alpha, A^n] \right) \quad (5.64b)$$

Durch Betrachtung dieses Ausdrucks in führender Ordnung in  $\gamma$  gilt zum einen für den dynamik-gebenden Kommutator  $[\hat{P}_1^\alpha, A^n] \neq 0$ , jedoch gilt für alle weiteren Berechnungen bekanntlich  $\hat{P}_1^\alpha A^n = A^n \hat{P}_1^\alpha$ , was im Rahmen der Näherung konsistent ist. Für die Zentralspinoperatoren gelten hingegen in dieser Näherung keine speziellen Bedingungen, sodass

$$\hat{S}_0^\alpha \hat{\sigma}_m = \hat{\sigma}_m \hat{S}_0^\alpha + [\hat{S}_0^\alpha, \hat{\sigma}_m] = -\hat{\sigma}_m \hat{S}_0^\alpha \quad , \quad m \neq \alpha, m \neq 0 \quad , \quad (5.65)$$

gilt. Hier spiegelt sich die Inkonsistenz wieder, da sich die Kommutatoren bei der Vertauschung von Zentralspin- und Feldanteil in (5.64b) ohne Approximation kompensieren. Dies ist nun nicht mehr gegeben, wodurch wegen

$$(\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A))^\dagger = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left( [\hat{S}_0^\alpha, \hat{\sigma}_m] \hat{P}_1^\alpha A - \hat{\sigma}_m \hat{S}_0^\alpha [\hat{P}_1^\alpha, A] \right) \neq -\mathcal{L}(\hat{\sigma}_m A) \quad (5.66)$$

die Anti-Hermitizität für  $m \neq \alpha$  und  $m \neq 0$  nicht mehr gegeben ist. Die Relation (5.65) wird nun durch den Imaginärteil des ursprünglichen Multiplikationsoperators (5.42) beschrieben und erlaubt nur Gleichheit der beiden Operatoren, wenn  $\hat{S}_0^\alpha \hat{\sigma}_m = \hat{\sigma}_m \hat{S}_0^\alpha = 0$  gegeben ist. Das rechtfertigt somit die neue Definition

$$\langle n | \tilde{M}_k | m \rangle := \begin{cases} \delta_{mk} & \text{falls } n = 0 \\ \delta_{nk} & \text{falls } m = 0 \\ 0 & \text{falls } m, n \neq 0 \end{cases} \quad , \quad k \in \{1, 2, 3\} \quad (5.67)$$

für den Multiplikationsoperator.

Wie sich in Kapitel 5.5 zeigen wird, liefert die Zeitentwicklung für die modifizierte Zentralspin-Multiplikation mit dieser Definition sinnvolle Ergebnisse.

### 5.4.5 Trunkierungsschema

Die Anzahl der Iterationen in der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen bestimmt die maximale Zeit  $t_{\max}$ , für welche die Zeitentwicklung des Zentralspins sinnvolle Ergebnisse liefert. Die Begründung hierfür ist, dass die iterative Anwendung des effektiven Hamiltonoperators äquivalent zu der Entwicklung des betrachteten Operators in immer höheren Potenzen in der Zeit  $t$  ist. Die Anzahl der Iterationen ist offensichtlich ebenfalls direkt an die Quantenzahlen  $n_{j,\alpha}$  der entstehenden Basiszustände gekoppelt, was hier den Ansatz für ein Trunkierungsschema liefert.

Bei einer Anwendung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  entstehen neue Operatoren, die eine größere Anzahl von Bosonen beschreiben, welche über immer mehr Stufen  $j$  verteilt sind. Dies ermöglicht wiederum eine größere maximale Simulationszeit  $t_{\max}$  zu betrachten. Die Trunkierung besteht nun darin, die Bosonenanzahlen  $n_{j,\alpha}$  zu begrenzen. Die Komponenten  $\alpha$  sind gleichberechtigt und durch ein Hüpfen von Bosonen zwischen den Komponenten innerhalb eines Feldes mit der Stufe  $j$  ändert sich deren Gesamtanzahl nicht. Dies ermöglicht letztendlich verschiedene  $n_{j,\max}$  zu definieren, sodass ein Basisoperator trunkiert wird, sobald

$$\sum_{\alpha} n_{j,\alpha} \geq n_{j,\max} \quad (5.68)$$

gilt.

Nun ist die mit Abstand stärkste Wechselwirkung durch das Feld der Stufe  $j = 1$  gegeben, da sie die einzige ist, die direkt an den Zentralspin koppelt. Deshalb wird  $t_{\max}$  hauptsächlich durch  $n_{1,\max}$  bestimmt. Wie sich in Kapitel 5.5 herausstellt, treten bei einer Trunkierung von  $n_1$  ab einer Zeit  $t_{\max}^{(1)} \geq t_{\max}$  unphysikalische Prozesse auf. Darum ist es nicht sinnvoll die Basisentwicklung fortzuführen sobald die Gleichung (5.68) für  $j = 1$  erfüllt ist. Das Schema besteht folglich darin, die Stufen mit  $j > 1$  nach Gleichung (5.68) zu trunkieren und die Iteration abubrechen, sobald die Trunkierungsschwelle für  $j = 1$  erreicht ist.

## 5.5 Resultate

In diesem Kapitel wird nun die Zeitentwicklung des Zentralspins über die iterierten Bewegungsgleichungen mit dem effektiven Hamiltonoperators  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\alpha}(h)$  aus Gleichung (5.60) analysiert. Dabei wird der angepasste Multiplikationsoperator genutzt, welcher der Definition (5.67) folgt. Ein externes Magnetfeld ist zunächst nicht vorhanden, sodass  $h = 0$  gilt. Der erste Schritt ist nun die Betrachtung eines statischen Overhauserfeldes, wodurch die Badspins keine Dynamik besitzen. Darauf folgend werden für ein dynamisches Bad die Stufen  $j$  sukzessive erhöht und deren jeweiliger Einfluss analysiert.

Falls nicht anders angegeben, wird von einem Bad mit  $N = \infty$  Kernspins ausgegangen, wobei deren effektive Anzahl durch den Parameter  $\gamma \approx 2/N_{\text{eff}}$  gegeben ist. Dieser wird zunächst auf  $\gamma = 10^{-2}$  gesetzt. Das ist zwar deutlich größer als realistische Werte, welche bei  $\gamma \approx 10^{-4}$  bis  $10^{-6}$  liegen [6, 11, 20, 21], jedoch ermöglicht es schon auf den hier betrachteten Zeitskalen Prozesse deutlicher zu erkennen.

### 5.5.1 Eingefrorenes Overhauserfeld und Merkulov-Lösung

Um die Wirkung der verschiedenen Prozesse im betrachteten System zu verstehen, ist es sinnvoll, mit einem konstanten oder auch eingefrorenen Overhauserfeld zu beginnen. Diese Annahme ist für kurze Zeiten begründet, da die zeitliche Änderung des Zentralspins  $\hat{\mathbf{S}}_0$  aufgrund der hohen Anzahl an Kernspins  $\mathbf{S}_i$  deutlich größer ist als die des Overhauserfeldes  $\hat{\mathbf{B}}$ . Deswegen wirkt es für den Zentralspin in erster Ordnung konstant. In den iterierten Bewegungsgleichungen bedeutet ein konstantes Overhauserfeld, dass der Anteil (II) in Gleichung (5.20) vernachlässigt wird, da dieser die Kommutation zwischen Overhauserfeld und Badanteil der Basisoperatoren und somit die Zeitentwicklung von  $\hat{\mathbf{B}}$  beschreibt. Damit ist die ganze Dynamik nur über die Kommutation des Zentralspinanteils gegeben.

Zum Vergleich zu einer Simulation mit den iterierten Bewegungsgleichungen kann eine analytische Lösung dieses Problems betrachtet werden, welche von Merkulov *et al.* [11] etabliert wurde. Der Ausgangspunkt ist die Zeitentwicklung für einen Spin  $\mathbf{S}$  in einem konstanten Magnetfeld  $\mathbf{B}$ , welche durch

$$\mathbf{S}(t) = (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \{\mathbf{S}_0 - (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}\} \cos(\omega_L t) - (\mathbf{S}_0 \times \mathbf{n}) \sin(\omega_L t) \quad (5.69)$$

gegeben ist. Dabei beschreibt  $\mathbf{S}_0$  die initiale Konfiguration des Spins, welcher anschließend mit der Larmorfrequenz

$$\omega_L = \mu_B g_e \frac{|\mathbf{B}|}{\hbar} \quad (5.70)$$

um das Magnetfeld  $\mathbf{B}$ , das in Richtung des Normalenvektors

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{B}}{|\mathbf{B}|} \quad (5.71)$$

zeigt, präzediert. Gleichung (5.69) wurde gegenüber dem Vorgehen von Merkulov *et al.* in Ref. [11] für die Definition des in dieser Arbeit verwendeten Magnetfeldes (2.3) angepasst. Wird diese Gleichung über eine gaußförmige Magnetfeldverteilung mit Varianz  $\sigma^2 = J_Q^2/4$  und Erwartungswert  $\mu = 0$  gemittelt, ergibt sich letztendlich die analytische Gleichung

$$S_M(t) = \langle \mathbf{S}(t) \mathbf{S}_0 \rangle = \frac{1}{12} \left\{ 1 + 2 \left[ 1 - \frac{J_Q^2}{4} t^2 \right] \cdot \exp \left[ -\frac{J_Q^2}{8} t^2 \right] \right\} \quad (5.72)$$

für die Autokorrelationsfunktion, welche fortan als Merkulov-Lösung bezeichnet wird.

In Abbildung 5.3 ist diese Lösung bis  $t = 100 J_Q^{-1}$  im Vergleich mit Simulationen durch die iterierten Bewegungsgleichungen für verschiedene Trunkierungsgrenzen  $n_{1,\max}$  dargestellt. Damit können die Effekte analysiert werden, welche ab der durch die Trunkierung gegebene Zeit  $t_{\max}$  auftreten. Da die gesamte Wechselwirkung nur zwischen dem Zentralspin und der Stufe  $j = 1$  stattfindet, befinden sich keine Bosonen in den Feldern der Stufen  $j > 1$ . Die Berechnung der Autokorrelationsfunktion mit

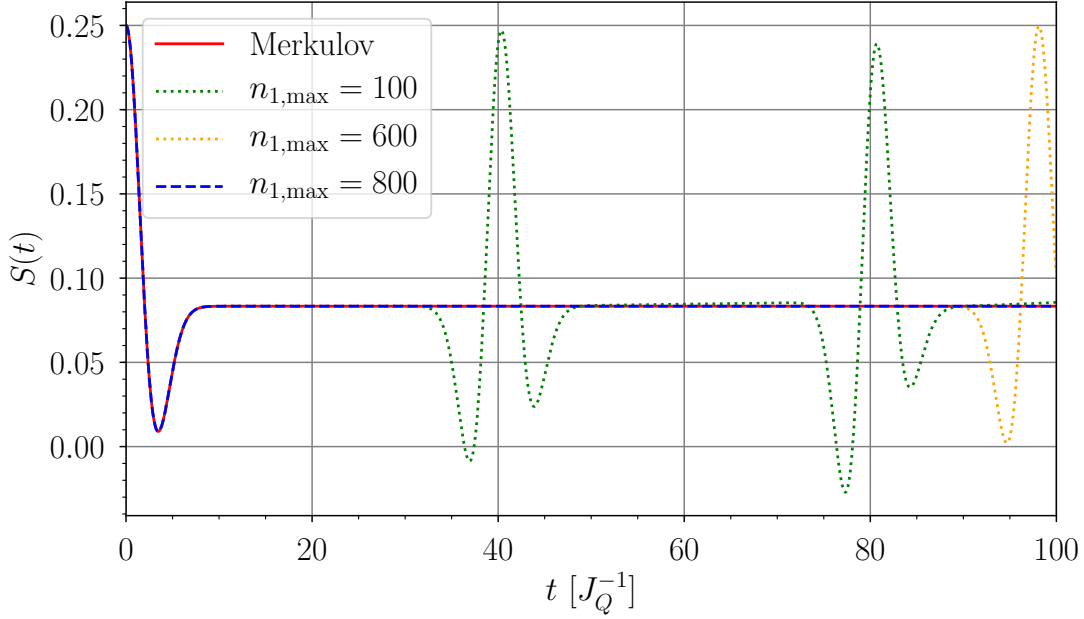


Abbildung 5.3: Vergleich der Merkulov-Lösung mit Lösungen der iterierten Bewegungsgleichungen für  $n_{1,\max} = 100, 600$  und  $800$ , bei denen das Overhauserfeld  $\hat{\mathbf{B}}$  als statisch angenommen wird.

den iterierten Bewegungsgleichungen liegen auf der analytischen Merkulov-Lösung und nähern sich nach dem charakteristischen ersten Minimum dem Grenzwert

$$S(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{12} \quad . \quad (5.73)$$

Der typische Abfall des Plateaus, welcher üblicherweise ab  $t \approx 10J_Q^{-1}$  auftritt, ist wegen der fehlenden Dynamik des Bades offensichtlich nicht vorhanden.

Weiterhin zeigen die Simulationen für  $n_{1,\max} = 100$  und  $n_{1,\max} = 600$  kurzzeitige starke Oszillationen. Diese sind für die unterschiedlichen Trunkierungsgrenzen in der Zeit verschoben und für ein festes  $n_{1,\max}$  treten sie periodisch auf. Die starken Abweichungen von der Merkulov-Lösung sind jedoch unphysikalisch. Durch die Trunkierung in der Stufe  $j = 1$  werden nur die Wechselwirkungen einer endlichen Anzahl von Kernspins mit dem Zentralspin betrachtet, obwohl das System unendlich ist. Diese Effekte beschreiben hier zu einer gewissen Zeit  $t$  eine Refokussierung, sodass die Spins im System wieder ähnlich der Anfangskonfiguration sind. Dadurch wird die Ähnlichkeit des Verlaufs nach den Maxima der unphysikalischen Oszillationen zum charakteristischen Anfang ersichtlich. Dass eine höhere Trunkierungsgrenze  $n_{1,\max}$  die Oszillationen zu größeren Zeiten verschiebt, beziehungsweise deren Periodendauer erhöht, unterstützt weiterhin die Aussage, dass es sich hier um einen unphysikalischen Effekt handelt.

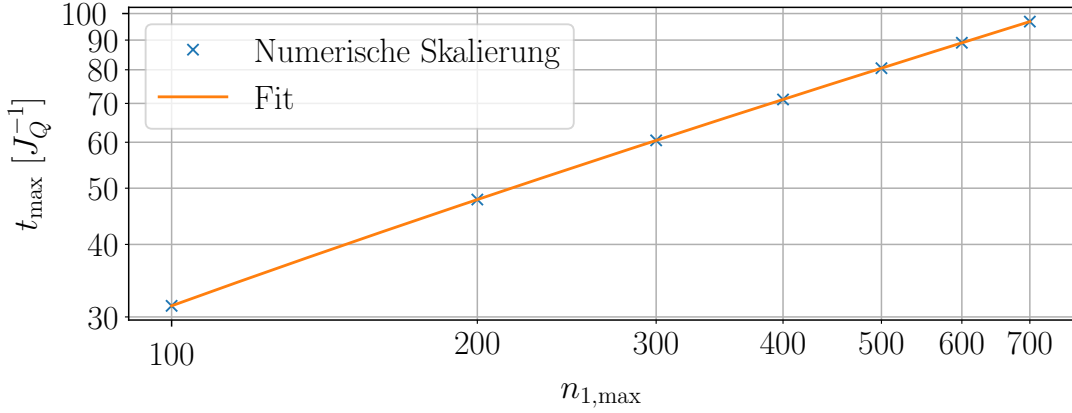


Abbildung 5.4: Numerische Skalierung und Ausgleichsrechnung der maximal erreichbaren Zeit  $t_{\max}$  in Abhängigkeit der Trunkierungsgrenze  $n_{1,\max}$  für ein statisches Overhauserfeld. Die maximale Zeit ist hier erreicht, wenn eine Abweichung von  $|\Delta_{\max}| = \sqrt{\gamma}/1000$  im Vergleich zur Simulation mit  $n_{1,\max} = 800$  überschritten wird.

Um diese Aussage zu unterstützen, wird eine Skalierung für das Auftreten der Abweichungen betrachtet. Dazu wird die Abweichung  $|\Delta|$  einer Zeitentwicklung für ein  $n_{1,\max}$  von einer Vergleichssimulation mit  $\tilde{n}_{1,\max} > n_{1,\max}$  betrachtet. Da die Dynamik im betrachteten System der Ordnung  $\mathcal{O}(\sqrt{\gamma})$  ist, wird  $|\Delta_{\max}| = \sqrt{\gamma}/1000$  gesetzt. Der Zeitpunkt  $t_{\max}^{(s)}$ , zu dem  $|\Delta| > |\Delta_{\max}|$  gegeben ist, wird in Abbildung 5.4 für verschiedene  $n_{1,\max}$  dargestellt. Eine exponentielle Ausgleichsrechnung zeigt, dass die Skalierung durch die Funktion

$$t_{\max}^{(s)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,88 \pm 0,03) \cdot n_{1,\max}^{0,503 \pm 0,01} - (8,06 \pm 0,13) \right] J_Q^{-1} \quad (5.74)$$

gegeben ist. Sie ist demnach in etwa proportional zur Quadratwurzel der Trunkierungsgrenze. Durch die Skalierung wird deutlich, dass die volle Zeitentwicklung nur für  $n_{1,\max} = \infty$  möglich ist, da nur dann für das unendliche System alle Wechselwirkungen berücksichtigt werden. In diesem Fall treten die periodischen Oszillation jedoch niemals auf, wodurch bestätigt ist, dass sie unphysikalisch sind. Für eine trunkierte Simulation ist eine Betrachtung nach Beginn der ersten auftretenden Refokussierung demnach nicht mehr sinnvoll.

### 5.5.2 Dynamisches Overhauserfeld

Bei einem dynamischen Overhauserfeld wird nun relevant, wie viele Stufen  $j$  betrachtet werden und wie hoch deren jeweilige Trunkierungsgrenze  $n_{j,\max}$  gewählt wird. Höhere Trunkierungsgrenzen ermöglichen zwar, größere, physikalisch sinnvolle Zeiten  $t_{\max}$  zu berechnen, jedoch gehen sie offensichtlich auch mit einer teilweise signifikanten Vergrößerung des zu lösenden Bewegungsgleichungssystems einher. Dies kann bei schlecht

gewählten Grenzen dazu führen, unnötig viel Speicher zu benötigen, ohne dabei größere Zeiten  $t_{\max}$  zu erreichen.

Das wird bei der Betrachtung der Abbildung 5.5 schnell deutlich. Hier ist die maximal erreichbare Zeit  $t_{\max}$  in Abhängigkeit der Trunkierungsgrenzen für  $j = 1$  und  $j = 2$  aufgetragen. Offensichtlich bringt die bloße Erhöhung nur einer der beiden Trunkierungsschwellen ab einem gewissen Punkt keine Vergrößerung von  $t_{\max}$  mehr, ohne die jeweils andere ebenfalls zu erhöhen. Für eine gewünschte Zeit  $t_{\max}$  gibt es demnach eine, im Bezug auf die Ressourcen, optimale Konfiguration der Trunkierungsgrenzen, die im folgenden über Skalierungen gefunden werden sollen. Dazu wird für die ersten zwei Stufen  $j = 1, 2$  jeweils eine Skalierung der Zeit  $t_{\max}^{(j)}$  in Abhängigkeit der Parameter  $n_{j,\max}$  gesucht, sodass schließlich eine optimale Konfiguration für diese Trunkierungsgrenzen gefunden werden kann. Für  $j = 3$  ist die quantitative Bestimmung einer Skalierung nicht mehr möglich, da die vorhandenen Ressourcen nicht ausreichend sind. Deswegen wird für hier nur der Einfluss der Trunkierung bis zu einer Höhe von maximal  $n_{3,\max} = 1$  untersucht.

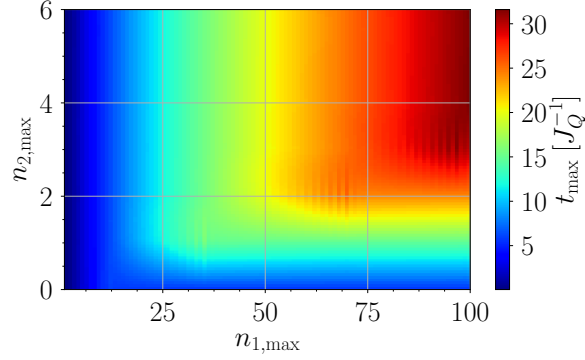


Abbildung 5.5: Qualitative Skalierung der Trunkierungsstufen  $n_{1,\max}$  und  $n_{2,\max}$ . Die maximale Zeit ist hier erreicht, wenn eine Abweichung von  $|\Delta_{\max}| = \sqrt{7}/1000$  im Vergleich zur Simulation mit  $n_{1,\max} = 200$  und  $n_{2,\max} = 8$  überschritten wird.

### 5.5.2.1 Stufe $j = 1$

Wird nur die erste Stufe  $j = 1$  betrachtet, so wird neben der Erzeugung und Vernichtung von Bosonen durch den Zentralspin ebenfalls die Dynamik zwischen den Komponenten des Feldes  $\hat{\mathbf{P}}_1$  relevant. Der Verlauf der Zeitentwicklung ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Dabei wird zum Vergleich zum Einen die Merkulov-Lösung aufgetragen. Des Weiteren wird eine klassische Berechnung zum Vergleich herangezogen [25]. Diese nutzt ebenfalls hierarchische, jedoch vollkommen klassische Felder, weswegen auch hier nur die Stufe  $j = 1$  betrachtet werden kann. Die Badgröße wird für die Vergleichbarkeit ebenfalls auf  $N = \infty$  gesetzt.

Es zeigt sich auf der Zeitskala bis  $t \approx 90J_Q^{-1}$  ein ähnliches Verhalten wie bei einem statischen Overhauserfeld. Ab einer Zeit von  $t \approx 3J_Q^{-1}$  beginnt jedoch sowohl die klassische Methode als auch die quantenmechanische Betrachtung über die iterierten Bewegungsgleichungen leicht von der Merkulov-Lösung abzuweichen. Die Berücksichtigung der Bosonenbewegung innerhalb des Feldes der Stufe  $j = 1$  hebt dabei beide Simulationen leicht an, wodurch sie etwas über der analytischen Lösung für ein statisches Bad liegen. Dabei sind geringe Unterschiede zwischen klassischer und quantenmechanischer

Betrachtung zu erkennen. Letztere hat ein etwas tieferes charakteristisches Minimum, jedoch ein leicht höheres Plateau, welches für die betrachtete Zeitskala nahezu konstant bleibt. Der typische Abfall des Plateaus ist demnach auch für  $j = 1$  noch nicht zu erkennen.

Bei  $t \approx 90J_Q^{-1}$  ist, wie schon bei der Betrachtung mit einem statischen Overhauserfeld, ein Refokussierungseffekt zu sehen. Um nun ebenfalls eine Skalierung der maximal erreichbaren Zeit  $t_{\max}^{(1)}$  zu erhalten, wird ähnlich wie in Kapitel 5.5.1 vorgegangen. Da das Ziel eine optimale Konfiguration der Trunkierungsgrenzen möglichst vieler Stufen  $j$  ist, wird hier jedoch ebenfalls der Einfluss der Grenzen  $n_{j,\max}$  für  $j > 1$  auf die Skalierung betrachtet.

In Abbildung 5.7 sind Skalierungen für  $t_{\max}(n_{1,\max})$  für verschiedene  $n_{2,\max}$  dargestellt. Dabei ist bei Grenzen von  $n_{1,\max} = 100$  bis 150 nur eine sehr geringe Diskrepanz zu erkennen. Ab  $t \approx 200J_Q^{-1}$  beginnt zunächst die Skalierung mit  $n_{2,\max} = 0$  sichtbar von denen der anderen Konfigurationen abzuweichen. Da sie die maximale Zeit  $t_{\max}$  im Vergleich zu den Skalierungen mit größeren  $n_{2,\max}$  unterschätzt, kann sie als untere Schranke für die maximal erreichbare Zeit mit  $j = 2$  Stufen gesehen werden. Wie in den Nahaufnahmen in Abbildung 5.7 zu erkennen ist, driften die weiteren Skalierungen für ein ansteigendes  $n_{1,\max}$  ebenfalls auseinander. Die gesamte Aufspaltung geschieht jedoch offenbar alternierend. Die exponentiellen Ausgleichsrechnungen für die Skalierung

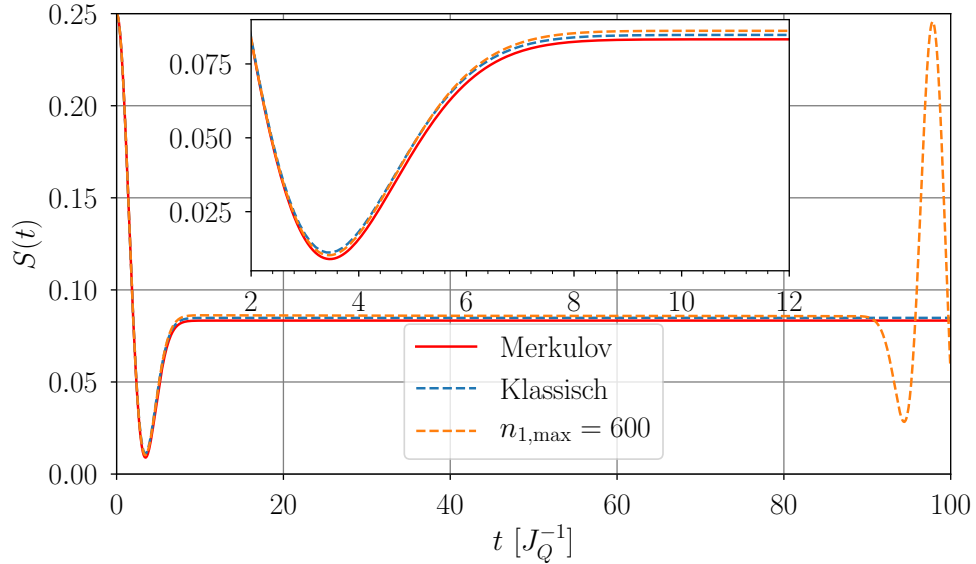


Abbildung 5.6: Vergleich der Merkulov-Lösung und einer klassischen Rechnung [25] zu einer Simulation mit den iterierten Bewegungsgleichungen mit  $n_{1,\max} = 600$ . Die klassische Simulation folgt dabei einer vergleichbaren Hierarchie-Methode mit der Lanczos-Rekursion wie sie in dieser Arbeit vorgestellt wird. Für sie wird hier ebenfalls  $j = 1$  und  $N = \infty$  gesetzt. Alle Simulationen nutzen den Kopplungsfaktor  $\gamma = 10^{-2}$ .

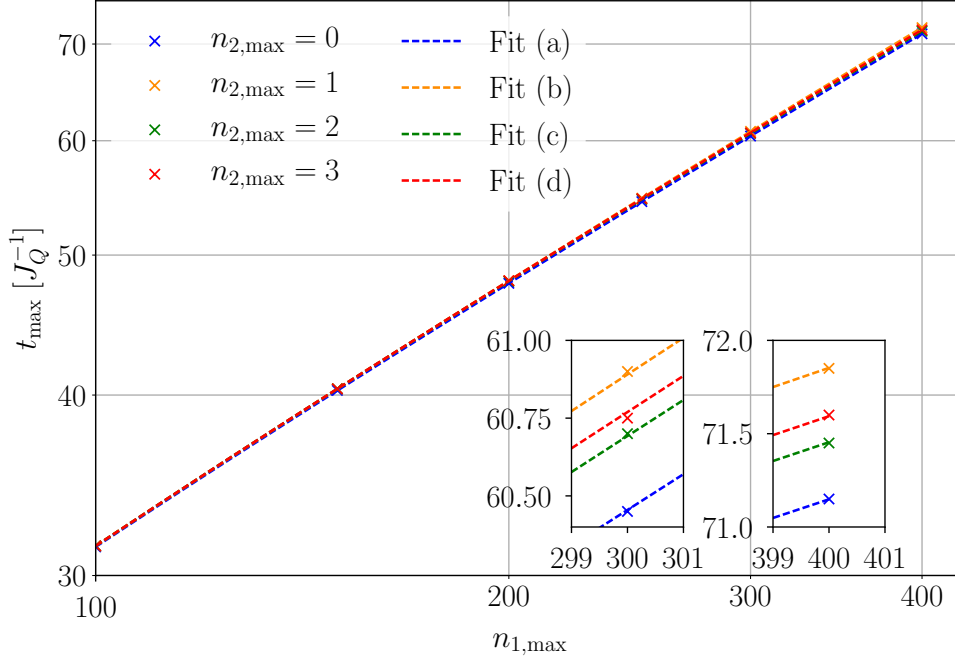


Abbildung 5.7: Numerische Skalierungen und zugehörige exponentielle Ausgleichsrechnungen (5.75) der maximal erreichbaren Zeit  $t_{\max}$  in Abhängigkeit der Trunkierungsgrenze  $n_{1,\max}$  für verschiedene  $n_{2,\max}$ . Die maximale Zeit ist hier erreicht, wenn eine Abweichung von  $|\Delta_{\max}| = \sqrt{\gamma}/1000$  im Vergleich zur Simulation mit  $n_{1,\max} = 600$  und zugehörigem  $n_{2,\max}$  (siehe Legende) überschritten wird. Dabei gilt  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 2$ .

aus Abbildung 5.7 sind dabei durch

$$t_{\max}^{(1a)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,73 \pm 0,03) \cdot n_{1,\max}^{0,509 \pm 0,001} - (7,40 \pm 0,13) \right] J_Q^{-1} \quad , \quad (5.75a)$$

$$t_{\max}^{(1b)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,33 \pm 0,03) \cdot n_{1,\max}^{0,527 \pm 0,001} - (6,13 \pm 0,12) \right] J_Q^{-1} \quad , \quad (5.75b)$$

$$t_{\max}^{(1c)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,76 \pm 0,04) \cdot n_{1,\max}^{0,508 \pm 0,001} - (7,65 \pm 0,16) \right] J_Q^{-1} \quad , \quad (5.75c)$$

$$t_{\max}^{(1d)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,64 \pm 0,06) \cdot n_{1,\max}^{0,513 \pm 0,002} - (7,25 \pm 0,23) \right] J_Q^{-1} \quad (5.75d)$$

gegeben. Wegen des alternierenden Verhaltens für die ersten Werte von  $n_{2,\max}$  liegt die Vermutung nahe, dass die Skalierung  $t_{\max}^{(1)}$  für  $n_{2,\max} \rightarrow \infty$  zwischen den Funktionen  $t_{\max}^{(1c)}(n_{1,\max})$  und  $t_{\max}^{(1d)}(n_{1,\max})$  liegt. Wie schon für das statische Overhauserfeld ist diese nahezu proportional zur Quadratwurzel.

Bei dieser Betrachtung wurden die Stufen  $j > 2$  außer Acht gelassen. In Abbildung 5.8 wird jedoch deutlich, dass die Stufe  $j = 3$  für die verwendeten  $n_{1,\max}$  schon keinen Einfluss mehr auf die Skalierung hat. Sie zeigt einen Vergleich der Funktion  $t_{\max}^{(1c)}(n_{1,\max})$  mit einer vergleichbaren Skalierung, bei der zusätzlich  $n_{3,\max} = 1$  gesetzt ist. Dass hier

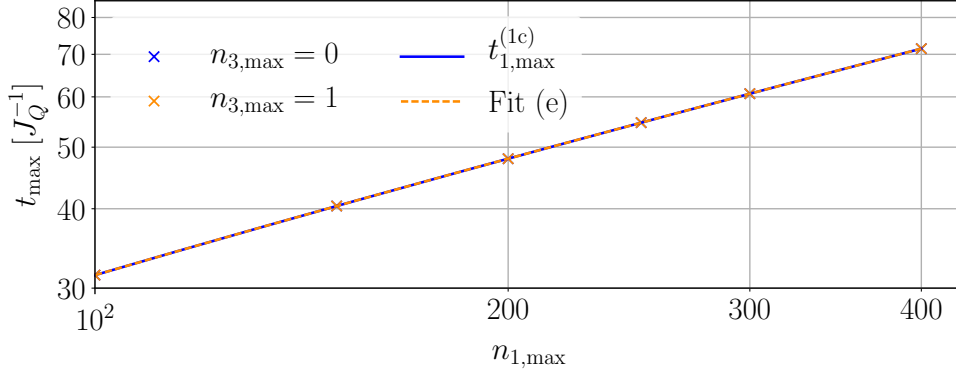


Abbildung 5.8: Numerische Skalierung und zugehörige exponentielle Ausgleichsrechnungen (5.76) der maximal erreichbaren Zeit  $t_{\max}$  in Abhängigkeit der Trunkierungsgrenze  $n_{1,\max}$  für  $n_{2,\max} = 2$  und verschiedene  $n_{3,\max}$ . Die maximale Zeit ist hier erreicht, wenn eine Abweichung von mehr als  $|\Delta_{\max}| = \sqrt{\gamma}/1000$  im Vergleich zur Simulation mit  $n_{1,\max} = 500$ ,  $n_{2,\max} = 2$  und zugehörigem  $n_{3,\max}$  (siehe Legende) überschritten wird. Dabei gilt  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 3$ .

nicht  $t_{\max}^{(1d)}(n_{1,\max})$  gewählt wurde ist dadurch begründet, dass es sinnvoller ist, eine untere Schranke für die maximale Zeit zu betrachten. Die Ausgleichsrechnung zeigt nun, dass

$$t_{\max}^{(1e)}(n_{1,\max}) = \left[ (3,76 \pm 0,04) \cdot n_{1,\max}^{0,508 \pm 0,001} - (7,65 \pm 0,16) \right] J_Q^{-1} = t_{\max}^{(1c)}(n_{1,\max}) \quad (5.76)$$

gilt. Die optimale Trunkierungsgrenze  $n_{1,\max}$  für eine Zeit  $t_{\max}$  kann demnach über

$$t_{\max}^{(1c)}(n_{1,\max}) \lesssim t_{\max}^{(1)}(n_{1,\max}) \quad (5.77)$$

bestimmt werden. Anhand der Tatsache, dass die Skalierung für  $n_{1,\max} = 0$  einen negativen Wert liefert, ist schon ersichtlich, dass diese Skalierung nur für größere Zeiten ab  $t \approx 30J_Q^{-1}$  gilt. Für Zeiten  $t > 70J_Q^{-1}$  ist weiterhin zu beachten, dass der Einfluss der Stufe  $j = 2$  immer relevanter wird, wodurch die Genauigkeit der Skalierung auch hier abnimmt.

### 5.5.2.2 Stufe $j = 2$

Wird die Stufe  $j = 2$  hinzugenommen, so werden in der bosonischen Betrachtung ebenfalls die Hüpfprozesse der Bosonen zwischen den Feldern  $\hat{\mathbf{P}}_1$  und  $\hat{\mathbf{P}}_2$  sowie zwischen den einzelnen Feldkomponenten  $\hat{P}_2^\alpha$  beschrieben. Die resultierende Zeitentwicklung ist für  $n_{1,\max} = 200$  und verschiedene  $n_{2,\max}$  in Abbildung 5.9 aufgetragen. Zum Vergleich ist wiederum eine klassische Rechnung der gleichen Stufe  $j = 2$  dargestellt.

Die zeitlichen Verläufe von klassischer und quantenmechanischer Simulation unterscheiden sich das erste mal sichtbar am charakteristischen Minimum, wie schon für

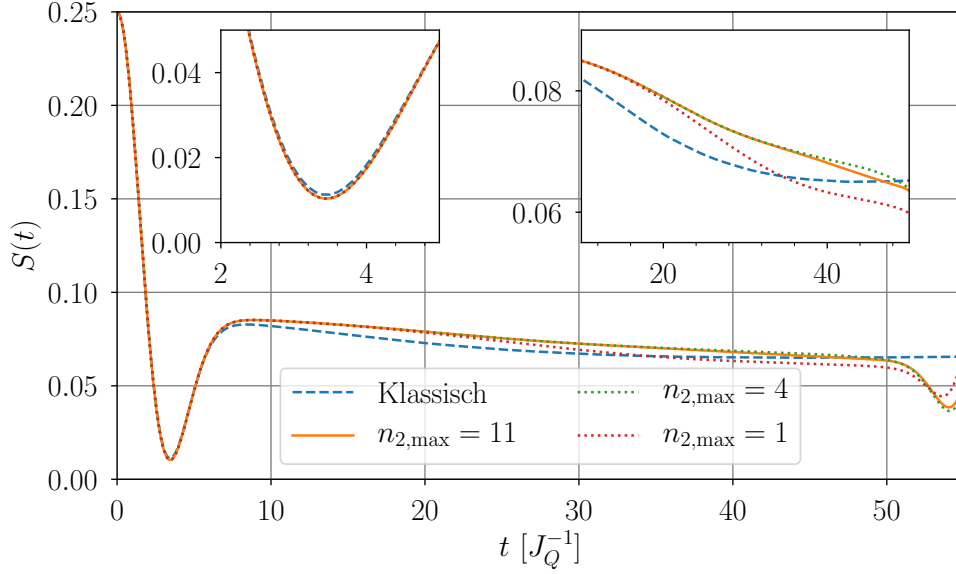


Abbildung 5.9: Vergleich einer klassischen Rechnung [25] zu einer Simulation mit den iterierten Bewegungsgleichungen mit  $n_{1,\max} = 210$  und verschiedenen  $n_{2,\max}$ . Die klassische Simulation folgt dabei einer vergleichbaren Hierarchie-Methode mit der Lanczos-Rekursion wie sie in dieser Arbeit vorgestellt wird. Für sie wird hier ebenfalls  $j = 2$  und  $N = \infty$  gesetzt. Alle Simulationen nutzen den Kopplungsfaktor  $\gamma = 10^{-2}$ .

$j = 1$ . Dies ist nicht verwunderlich, da der Einfluss der Wechselwirkungen mit ansteigenden Stufen  $j$  zu immer späteren Zeiten signifikant wird. Das Kurzzeitverhalten bis  $t \approx 6J_Q^{-1}$  ist nahezu ausschließlich durch den Zentralspin und das direkt an ihn gekoppelte Feld  $\hat{P}_1$  gegeben, sodass hier keine signifikanten Änderungen zur Stufe  $j = 1$  entstehen.

Der Einfluss einer Trunkierungsgrenze  $n_{2,\max} > 0$  wird besonders durch den charakteristischen Abfall der Autokorrelationsfunktion deutlich, welcher für die Stufe  $j = 2$  das erste mal sichtbar wird. In diesem Bereich liegt die klassische Simulation deutlich unter der quantenmechanischen. Dass sich beide Verläufe anschließend schneiden liegt im Besonderen daran, dass die betrachtete klassische Zeitentwicklung der Stufe  $j = 2$  nur bis  $t \approx 30J_Q^{-1}$  der vollen klassischen Simulation entspricht [25]. Danach steigt sie wieder an, was bei der quantenmechanischen Betrachtung auf dieser Zeitskala nicht passiert. Bei einer Zeit von  $t \approx 50J_Q^{-1}$  ist der durch die Trunkierung von  $n_{1,\max}$  entstehende Refokussierungseffekt zu erkennen. Eine Erhöhung von  $n_{2,\max}$  hat offensichtlich keinen Einfluss auf dessen Position, sondern nur auf die Ausprägung der Oszillationen. Die Nahaufnahme des charakteristischen Abfalls ab  $t \approx 8J_Q^{-1}$  in Abbildung 5.9 zeigt jedoch, wie sich die Autokorrelation für steigende  $n_{2,\max}$  schrittweise an die Berechnung mit  $n_{2,\max} = 11$  anpasst.

Nun wird für  $n_{2,\max}$  eine Skalierungsfunktion  $t_{\max}^{(2)}(n_{2,\max})$  gesucht. Dabei haben

unterschiedliche  $n_{1,\max} \gg n_{2,\max}$  keinen Einfluss auf die Skalierung, da nach dem Erreichen dieser Trunkierungsgrenze die Basisentwicklung abgebrochen und somit für  $j = 1$  keine Terme bis zur Zeit  $t_{\max}^{(1)}$  vernachlässigt werden. Eine sinnvolle Skalierung ist jedoch offensichtlich nur möglich, wenn  $t_{\max}^{(1)} > t_{\max}^{(2)}$  gilt. Allerdings muss der Einfluss von  $n_{3,\max}$  betrachtet werden. In Abbildung 5.10 sind dazu zwei Skalierungen aufgetragen, welche sich nur in  $n_{3,\max}$  unterscheiden. Die Ausgleichsrechnungen dazu sind durch

$$t_{\max}^{(2a)}(n_{2,\max}) = \left[ (120 \pm 58) \cdot n_{2,\max}^{0,11 \pm 0,05} - (105 \pm 58) \right] J_Q^{-1} \quad , \quad (5.78a)$$

$$t_{\max}^{(2b)}(n_{2,\max}) = \left[ (118 \pm 55) \cdot n_{2,\max}^{0,11 \pm 0,05} - (103 \pm 55) \right] J_Q^{-1} \quad (5.78b)$$

gegeben. Für die betrachteten  $n_{2,\max}$  ist nur ein marginaler Unterschied zu erkennen. Dabei liegt die Skalierung, welche die Trunkierungsgrenze  $n_{3,\max}$  vernachlässigt, leicht unter derjenigen mit  $n_{3,\max} = 1$ . Eine Betrachtung höherer  $n_{3,\max}$  ist wegen dem hohen Speicheraufkommen nicht mehr möglich. Die Natur der Prozesse zwischen  $\hat{P}_1$  und  $\hat{P}_2$  ist jedoch dieselbe wie zwischen  $\hat{P}_2$  und  $\hat{P}_3$ . Deswegen ist zu vermuten, dass sich die Skalierungen mit ansteigendem  $n_{3,\max}$  ebenfalls alternierend der exakten Skalierung  $t_{\max}^{(2)}(n_{2,\max})$  annähern. Die Ausgleichsrechnung, welche  $n_{3,\max}$  vernachlässigt, wird deswegen hier als untere Schranke angesehen. Es gilt somit

$$t_{\max}^{(2a)}(n_{2,\max}) \lesssim t_{\max}^{(2)}(n_{2,\max}) \quad . \quad (5.79)$$

Diese Skalierung ist offensichtlich nur für  $n_{2,\max} > 0$  sinnvoll. Die Zeit bei der eine Simulation mit  $n_{2,\max} = 0$  erstmals um mehr als  $|\Delta_{\max}|$  abweicht kann jedoch ebenfalls

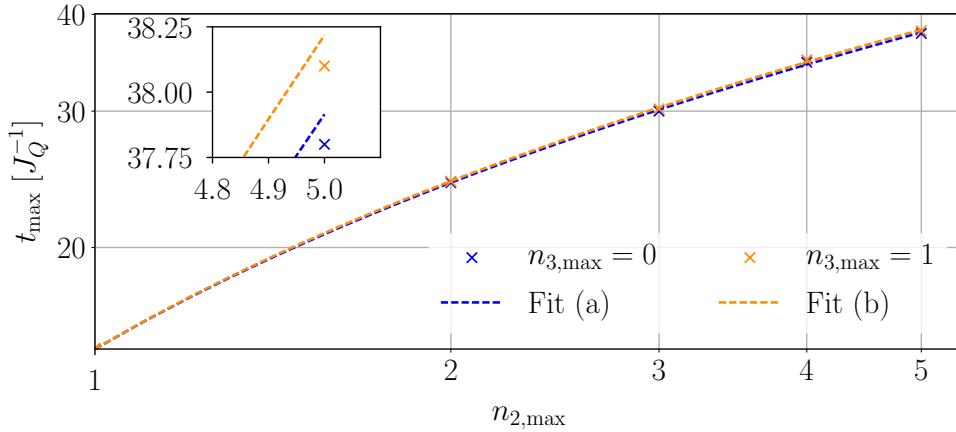


Abbildung 5.10: Numerische Skalierung und Ausgleichsrechnung (5.78) der maximal erreichbaren Zeit  $t_{\max}$  in Abhängigkeit der Trunkierungsgrenze  $n_{2,\max}$  bei einem festen  $n_{1,\max} = 200$  und  $n_{3,\max} = 0$ , sowie  $n_{3,\max} = 1$ . Die maximale Zeit ist hier erreicht, wenn eine Abweichung  $|\Delta| = \sqrt{\gamma}/1000$  im Vergleich zur Simulation mit  $n_{1,\max} = 200$  und  $n_{2,\max} = 6$  mit dem jeweils passenden  $n_{3,\max}$  überschritten wird. Dabei gilt  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 3$ .

bestimmt werden. Diese liegt bei

$$t_{\max}^{(2)}(0) = 5,75J_Q^{-1} \quad . \quad (5.80)$$

Das dieser Wert bei der Ausgleichsrechnung nicht beachtet wird, ist dadurch begründet, dass er nicht zum Verlauf der restlichen Daten passt. Eine mögliche Erklärung ist, dass diese Abweichung noch vor dem Plateau liegt. Durch die starken Änderungen des Verlaufs in diesem Bereich ist hier die Bestimmung der maximal erreichbaren Zeit über eine feste Abweichungsgrenze  $|\Delta_{\max}|$  offenbar nicht genau genug.

### 5.5.2.3 Stufe $j = 3$

Durch die Stufe  $j = 3$  entstehen weitere Korrekturen im Verlauf der Autokorrelationsfunktion. Da die Wirkung auf den Zentralspin mit zunehmendem  $j$  immer geringer wird, ist der Zeitpunkt, zu dem eine Trunkierungsgrenze  $n_{j,\max} > 0$  erstmalig signifikante Änderungen bringt, immer später. Demnach wird die Höhe von  $n_{3,\max}$  noch einmal relativ deutlich unter dem jeweils gewählten  $n_{2,\max}$  liegen. Eine quantitative Skalierung zu erstellen ist für diese Stufe jedoch nicht mehr möglich, da der Speicherbedarf für die nötigen Simulationen die vorhandenen Ressourcen übersteigt. Der Zeitpunkt, zu dem  $n_{3,\max} > 0$  einen bemerkbaren Einfluss hat, kann dennoch bestimmt werden.

Dazu wird als Vergleich eine Simulation mit  $n_{1,\max} = 200$ ,  $n_{2,\max} = 5$  und  $n_{3,\max} = 2$  betrachtet. Dies liefert die maximalen Zeiten

$$t_{\max}^{(3)}(0) = 20,95J_Q^{-1} \quad , \quad (5.81a)$$

$$t_{\max}^{(3)}(1) = 64,70J_Q^{-1} > t_{\max}^{(1)}(200) \quad . \quad (5.81b)$$

Bei diesen Werten wird die Wirkung der Stufe  $j = 4$  nicht mehr beachtet. Da der Effekt von einer Trunkierungsgrenze  $n_{3,\max}$  auf die Skalierung für  $n_{2,\max}$  nur sehr gering ist, wird dieser Effekt auf den betrachteten Zeitskalen bis  $t \approx 50J_Q^{-1}$  vernachlässigbar klein sein. Die Variation der Trunkierungsstufe  $n_{2,\max}$  hat noch einen minimalen Einfluss auf  $t_{\max}^{(3)}$ . Ab einer Grenze von  $n_{2,\max} > 2$  ist jedoch kein Unterschied des Wertes  $t_{\max}^{(3)}(0)$  mehr zu verzeichnen.

Für den zweiten Grenzwert gilt  $t_{\max}^{(3)}(1) > t_{\max}^{(1)}(200)$ , weswegen dieses Ergebnis nur bedingt genutzt werden kann. Durch den unphysikalischen Refokussierungseffekt ab  $t_{\max}^{(1)}(200) \approx 48J_Q^{-1}$  werden Abweichungen über diesen Zeitpunkt hinaus teilweise stark verfälscht, sodass auch die numerisch bestimmten Zeitpunkte für eine Skalierung als falsch angesehen werden müssen. Da jedoch die Abweichung der Simulation mit  $n_{3,\max} = 1$  bis zum Zeitpunkt  $t_{\max}^{(1)}(200)$  nicht über  $|\Delta_{\max}| = 10^{-4}$  steigt, kann dieser als untere Schranke für  $t_{\max}^{(3)}(1)$  angesehen werden.

Mit den Skalierungsfunktionen  $t_{\max}^{(1)}$  und  $t_{\max}^{(2)}$ , sowie dem Wissen über  $t_{\max}^{(3)}$  können nun optimale Konfigurationen gefunden werden. Um die Möglichkeiten dieses Ansatzes besser einschätzen zu können ist in Abbildung 5.11 eine Skalierung des minimal benötigten Arbeitsspeichers für ein 64-Bit-System gegeben. Dabei wird der gesamte Speicherbedarf der von Null verschiedenen Einträge der entstehenden Liouville-Matrix

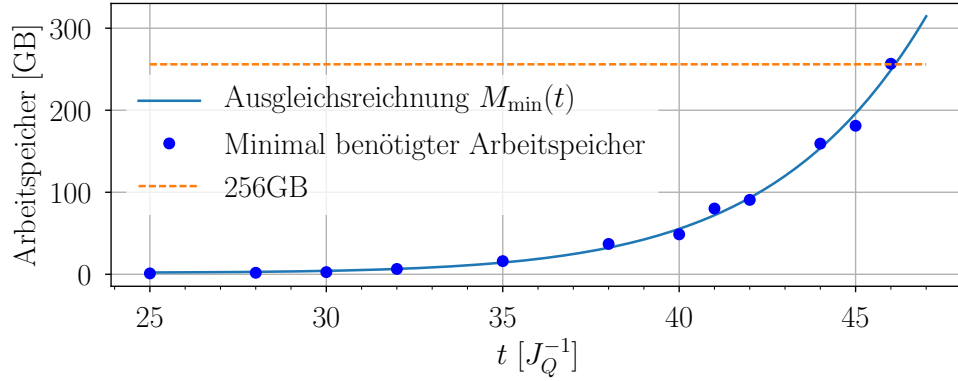


Abbildung 5.11: Skalierung des minimalen Bedarfs an Arbeitsspeicher bei optimalen Konfigurationen der Trunkierungsgrenzen in Abhängigkeit der Zeit.

und des Vektors mit für die Zeitentwicklung mit dem Runge-Kutta-Verfahren bestimmt. Die Ausgleichsrechnung ist durch

$$M_{\min}(t) = [(2 \pm 4 \cdot t^{10,9 \pm 0,7}) \cdot 10^{-16} + 2 \pm 4] \text{ GB} \quad (5.82)$$

gegeben. Der für diese Arbeit zur Verfügung stehende Arbeitsspeicher ist auf maximal 256GB begrenzt. Dabei ist zu beachten, dass dies eine untere Schranke ist, da lediglich das reine Speicheraufkommen durch das Bewegungsgleichungssystem beachtet wird. Der effektive Speicherbedarf liegt über dieser Skalierung. Eine Simulation die für Zeiten über  $t \approx 45J_Q^{-1}$  genaue Ergebnisse liefern soll, kann mit den vorhandenen Speicherressourcen jedoch definitiv nicht bestimmt werden.

In Abbildung 5.12 ist nun eine Berechnung der Autokorrelation mit einer optimalen Konfiguration für die Trunkierungsparameter dargestellt. Diese wird über die Skalierungsfunktionen  $t_{\max}^{(1)}$  und  $t_{\max}^{(2)}$  bestimmt und liefert für die mit 256GB maximal berechenbare Zeit von  $t \approx 45J_Q^{-1}$  die Grenzen

$$n_{1,\max} = 181 \quad n_{2,\max} = 8 \quad n_{3,\max} = 1 \quad . \quad (5.83)$$

Um den Einfluss der Stufe  $j = 3$  einschätzen zu können ist eine Berechnung mit denselben Grenzen für  $n_{1,\max}$  und  $n_{2,\max}$ , jedoch mit  $n_{3,\max} = 0$  dargestellt. Es zeigt sich in der Nahaufnahme, dass die Trunkierungsgrenze  $n_{3,\max} = 1$  die Autokorrelation ab  $t \approx 21J_Q^{-1}$  leicht absenkt. Dieser Effekt ist allerdings minimal. Zum Vergleich ist ein weiteres Mal die zugehörige klassische Simulation mit  $j = 3$  gezeigt, sowie eine Berechnung mit der DMRG-Methode. Die DMRG wurde hier für  $N = 500$  Badspins berechnet. Da jedoch der Unterschied bei einer Berechnung der iterierten Bewegungsgleichungen zwischen einem endlichen und einem unendlichen Bad exponentiell klein ist [25], sind im Besonderen auf dieser Zeitskala keine Unterschiede zwischen den Simulationen sichtbar. Dadurch ist ein Vergleich mit einer DMRG mit  $N = 500$  Spins gerechtfertigt.

Im charakteristischen Minimum ist zu erkennen, dass die quantenmechanische Berechnung mit den iterierten Bewegungsgleichungen näher an der DMRG liegt, als die

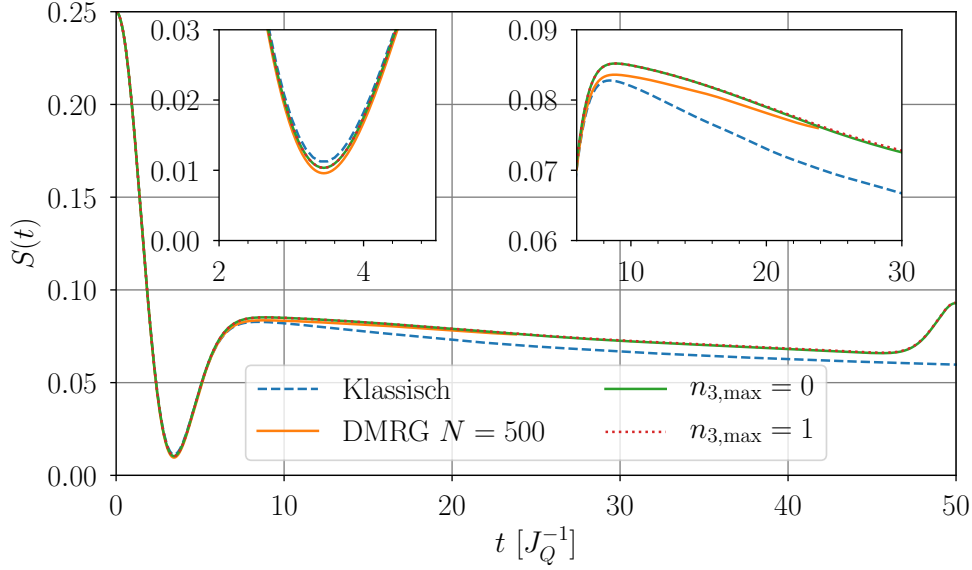


Abbildung 5.12: Vergleich einer Simulation mit den iterierten Bewegungsgleichungen mit  $n_{1,\max} = 181$ ,  $n_{2,\max} = 8$  und  $n_{3,\max} = 1$  zur Rechnung mit  $n_{3,\max} = 0$ , sowie zu einer klassischen [25] und einer DMRG-Rechnung. Die klassische Simulation folgt dabei einer vergleichbaren Hierarchie-Methode mit der Lanczos-Rekursion wie sie in dieser Arbeit vorgestellt wird. Für sie wird hier ebenfalls  $j = 3$  und  $N = \infty$  gesetzt. Alle Simulationen nutzen den Kopplungsfaktor  $\gamma = 10^{-2}$ .

klassische Simulation. Letztere fällt im Bereich des Plateaus deutlich schneller ab, als die beiden anderen Zeitentwicklungen. Die Lösung der iterierten Bewegungsgleichungen steigt dort etwas über die DMRG, nähert sich dieser bis  $t \approx 25J_Q^{-1}$  allerdings wieder an. Die DMRG wird jedoch abgebrochen, sobald das akkumulierte vernachlässigte Gewicht der Dichtematrix einen Wert von  $\Delta_{\text{DMRG}} > 1/1000$  überschreitet [22], wodurch hier nur ein Vergleich bis etwa  $t \approx 25J_Q^{-1}$  möglich ist.

Um das Langzeitverhalten ebenfalls zu bewerten, wird ein Vergleich mit der Methode der Chebyshev-Expansion (CET) durchgeführt [14–16]. Dies ermöglicht zwar nur eine kleine Badgröße von  $N = 18$  Spins, jedoch dafür eine Betrachtung längerer Zeiten. Dazu werden die Daten aus Abbildung 4a aus Ref. [14] für  $r_0 = 1,0$  genutzt. Dabei hat das Verhältnis  $r_0$  dieselbe Bedeutung, wie der Parameter  $x$ , welcher in (2.7) definiert ist. Damit die Simulationen vergleichbar sind muss demnach für die iterierten Bewegungsgleichungen ebenfalls  $N = N_0 = 18$  und somit  $\gamma = 1/18$  gewählt werden.

In Abbildung 5.13 sind beide Berechnungen der Autokorrelationsfunktionen dargestellt. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie beim Vergleich mit der DMRG. Das charakteristische Minimum ist bei den iterierten Bewegungsgleichungen nicht so stark ausgeprägt wie bei der Vergleichsrechnung über die CET. Auch der Anstieg über die Autokorrelationsfunktion der CET beim Übergang in das Plateau und die darauf folgende Annäherung ist hier zu sehen. Da der Effekt stärker ausgeprägt ist, als bei der

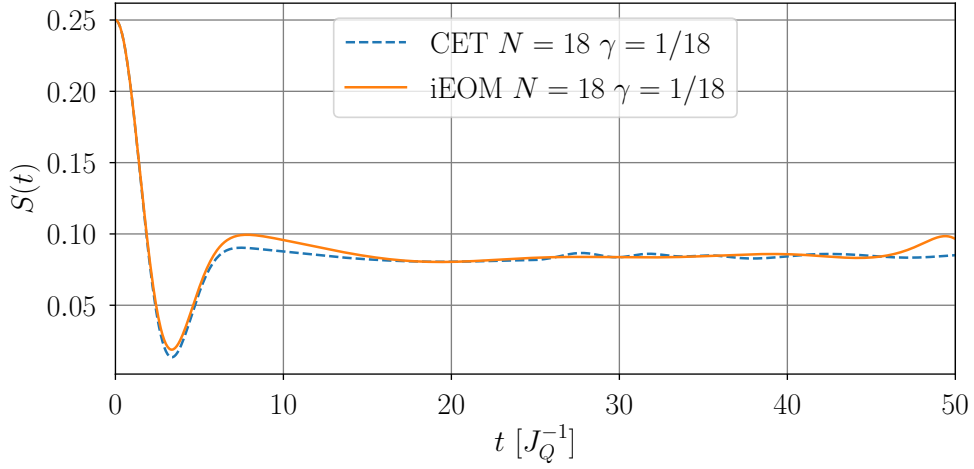


Abbildung 5.13: Vergleich einer Simulation mit den iterierten Bewegungsgleichungen mit  $n_{1,\max} = 181$ ,  $n_{2,\max} = 8$  und  $n_{3,\max} = 1$  zu einer Berechnung mit der Chebyshev-Expansion (Abbildung 4a, Ref. [14],  $r_0 = 1$ ) jeweils für  $\gamma = 18$ .

DMRG, ist eine naheliegende Erklärung, dass der Anfangsbereich durch eine zu große Wahl von  $\gamma$  nicht korrekt beschrieben ist, da die genutzten Näherungen für die betrachtete Basis nur für kleine  $\gamma \ll 1$  gelten. Ab  $t \approx 15J_Q^{-1}$  stimmen die Berechnungen beider Ansätze jedoch sehr gut überein, bis die Trunkierungseffekte der iterierten Bewegungsgleichungen bei  $t \approx 45J_Q^{-1}$  auftreten. Dies deutet darauf hin, dass das Verhalten für mittlere bis lange Zeiten über die Basis der Hermitepolynome von orthogonalen Polynomen korrekt beschrieben wird.

#### 5.5.2.4 Simulation mit Magnetfeld

Nun werden Simulationen mit einem transversalen, externen Magnetfeld der Stärke  $h$  betrachtet. Dazu wird in Gleichung (5.60) die Komponente  $\alpha = x$  gesetzt. Zunächst wird der Einfluss verschiedener Magnetfeldstärken betrachtet. Dazu sind in Abbildung 5.14 Simulationen für Magnetfelder mit  $h = 0,1J_Q$  bis  $h = 5,0J_Q$  im Vergleich zu einer Zeitentwicklung ohne Magnetfeld dargestellt. Durch ein longitudinales Magnetfeld wird das Kurzzeitverhalten durch eine verschobene Zeitskala  $\tilde{J}_Q$  bestimmt [14]. Diese ist durch

$$\tilde{J}_Q = \sqrt{J_Q^2 + 2\omega_L^2} \quad (5.84)$$

gegeben, wobei  $\omega_L \propto h$  die Larmorfrequenz (5.70) ist. Das Magnetfeld der Stärke  $h = 0,1J_Q$  hat somit wenig Relevanz für den Verlauf der Autokorrelation, da das Feld, welches durch das Bad erzeugt wird, noch dominant ist. Bei ansteigenden externen Magnetfeldstärken wird der Einfluss jedoch sichtbar. Das charakteristische Minimum ist immer stärker ausgeprägt und verschiebt sich in Richtung  $t = 0$ . Dabei geht der Verlauf der Zeitentwicklung in diesem Bereich schrittweise in eine gedämpfte Oszillation über.

Bei einer Stärke von  $h = 5,0J_Q$  ist das externe Magnetfeld dominant gegenüber dem Overhauserfeld. Die Oszillationen entstehen durch die Präzession des Zentralspins um das transversale Magnetfeld. Die hyperfeine Wechselwirkung bleibt der Ursprung der Dephasierung weswegen die charakteristische Zeitskala der Abnahme der Amplitude weiterhin durch  $J_Q$  gegeben ist. Die einhüllende Funktion der gedämpften Schwingung ist dabei durch

$$S_H(t) = \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{J_Q^2}{8} t^2\right) \quad (5.85)$$

gegeben [11, 14, 24]. In Abbildung 5.15 wird diese Funktion zusammen mit einer Berechnung mit der Methode der DMRG, sowie zwei verschiedenen Zeitentwicklungen mit den iterierten Bewegungsgleichungen dargestellt. Dabei werden zwei verschiedene Trunkierungen genutzt. Beide Berechnungen nutzen dasselbe  $n_{1,\max} = 119$ , jedoch werden bei einer der beiden Simulationen die Grenzen  $n_{2,\max}$  und  $n_{3,\max}$  über die zuvor bestimmten Skalierungen passend gesetzt, während die andere diese vernachlässigt.

Die Abnahme der Amplitude der Oszillationen mit  $S_H(t)$  wird in Abbildung 5.15 bestätigt. Weiterhin zeigt sich, dass für ein hinreichend großes Magnetfeld DMRG und iterierte Bewegungsgleichungen übereinstimmen. Allerdings tritt auch hier ab einer Zeit  $t_{\max}$  der unphysikalische Refokussierungseffekt auf.

Die beiden Simulationen mit den iterierten Bewegungsgleichungen für das angelegte externe Magnetfeld liegen ebenfalls aufeinander. Das bedeutet, dass für hinreichend große Magnetfelder nur die Stufe  $j = 1$  relevant und somit nur die Trunkierungsgrenze

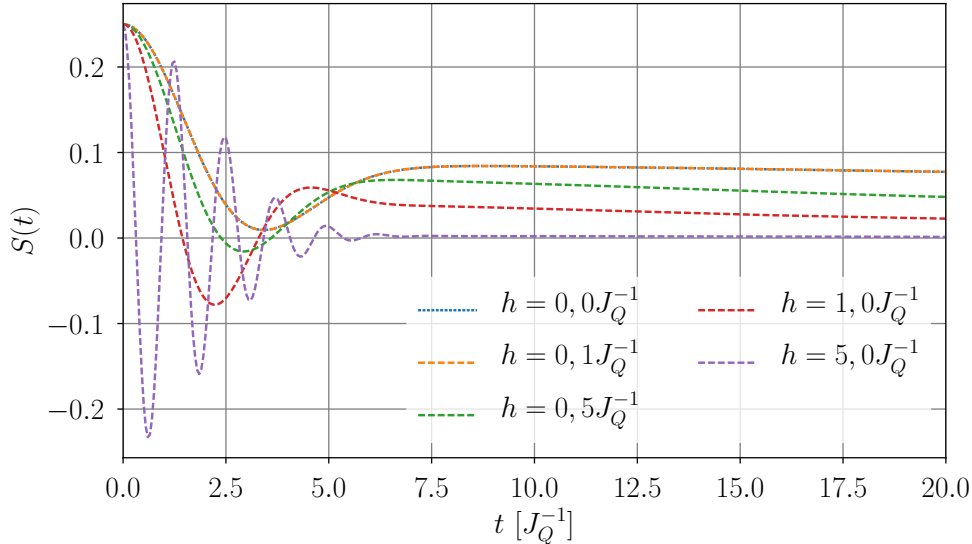


Abbildung 5.14: Vergleich verschiedener Magnetfeldstärken  $h$  für Simulationen mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen. Dabei werden die Trunkierungsgrenzen  $n_{1,\max} = 51$ ,  $n_{2,\max} = 2$  und  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 2$  verwendet.

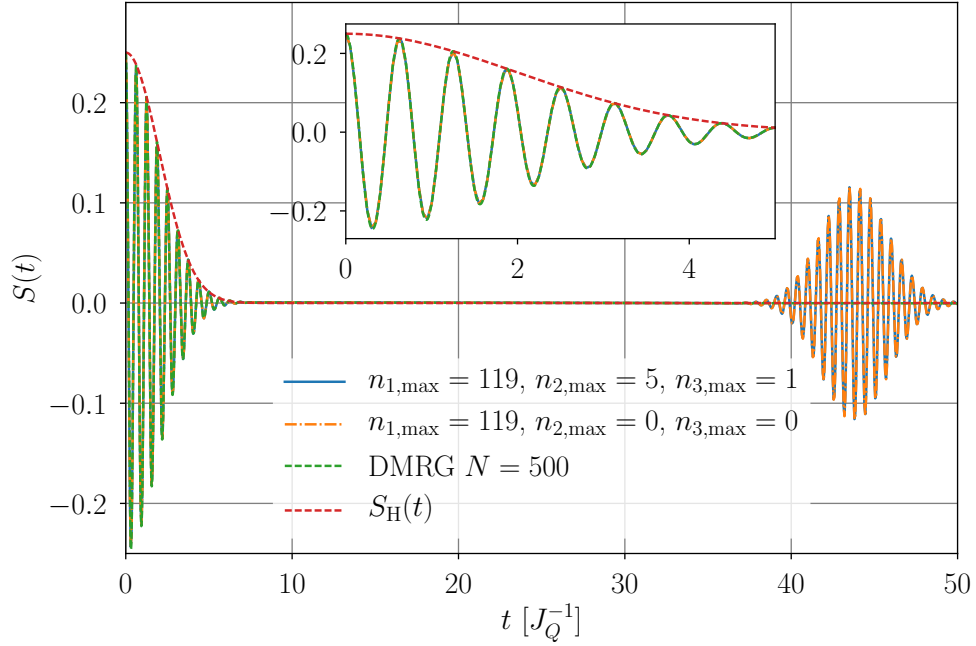


Abbildung 5.15: Vergleich einer Simulation über die DMRG-Methode mit zwei verschiedenen Rechnungen mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen bei einer Magnetfeldstärke von  $h = 10J_Q$ . Für die Trunkierungsgrenzen siehe Legende. Es gilt  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 3$ . Weiterhin ist die einhüllende Funktion der Präzession des Zentralspins  $S_H(t)$  aus Gleichung (5.85) gezeigt.

$n_{1,\max} > 0$  zu setzen. Der Grund ist, dass die Wechselwirkungsprozesse zwischen den Stufen  $j$  wegen der Dominanz des Magnetfeldes stark unterdrückt sind. Dies erlaubt offensichtlich deutlich größere Zeiten zu simulieren. Jedoch ist für  $t \gtrsim 10J_Q^{-1}$  keine Dynamik mehr zu verzeichnen, weswegen eine Zeitentwicklung für die  $zz$ -Autokorrelation darüber hinaus nicht mehr interessant ist.

Wird die Magnetfeldstärke auf  $h > 5J_Q$  vergrößert, so erhöht sich die Präzessionsfrequenz des Zentralspins weiter. Die Abnahme der Amplitude der Oszillationen, welche durch die einhüllende Funktion (5.85) beschrieben wird, bleibt jedoch gleich. Dazu sind in Abbildung 5.16 Simulationen über die iterierten Bewegungsgleichungen mit  $n_{1,\max} = 119$  für verschiedene Magnetfeldstärken  $h \geq 5J_Q$  dargestellt. Da die externen Felder groß genug sind werden hier die Stufen  $j > 1$  vernachlässigt.

Abschließend werden Simulationen mit der linearen Kopplungsverteilung (2.11) betrachtet. Dabei wird zum Vergleich eine rein klassische Lösung des Bewegungsgleichungssystems betrachtet. Die Daten dazu stammen aus Abbildung 8 aus Ref. [24] für  $N = 499$  Badspins und eine Feldstärke von  $h = 10J_Q$ .

Für die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen wird hier eine Trunkierung von  $n_{1,\max} = 51$  genutzt. Das ist ausreichend, da nur sehr kurze Zeiten betrachtet werden. Der Vergleich ist in Abbildung 5.17 dargestellt. Es zeigt sich, dass die klassische

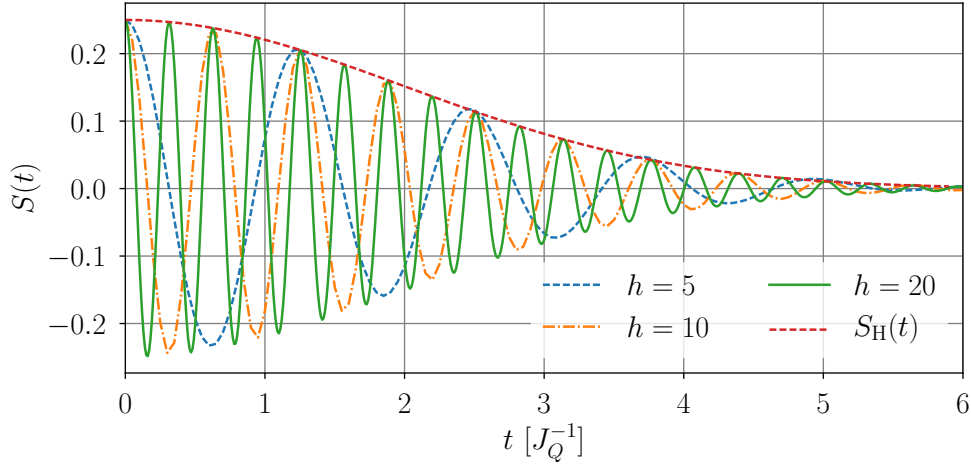


Abbildung 5.16: Vergleich von Simulationen mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen bei verschiedenen Magnetfeldstärken. Es gilt  $n_{1,\max} = 119$  und  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 1$ .

Methode mit der quantenmechanischen Methode über die iterierten Bewegungsgleichungen auch für die linearen Kopplungen übereinstimmt. Dies bestätigt den Vergleich von Stanek *et al.* mit der ebenfalls quantenmechanischen DMRG [24], wodurch die drei Methoden für ein hinreichend großes Magnetfeld äquivalent sind.

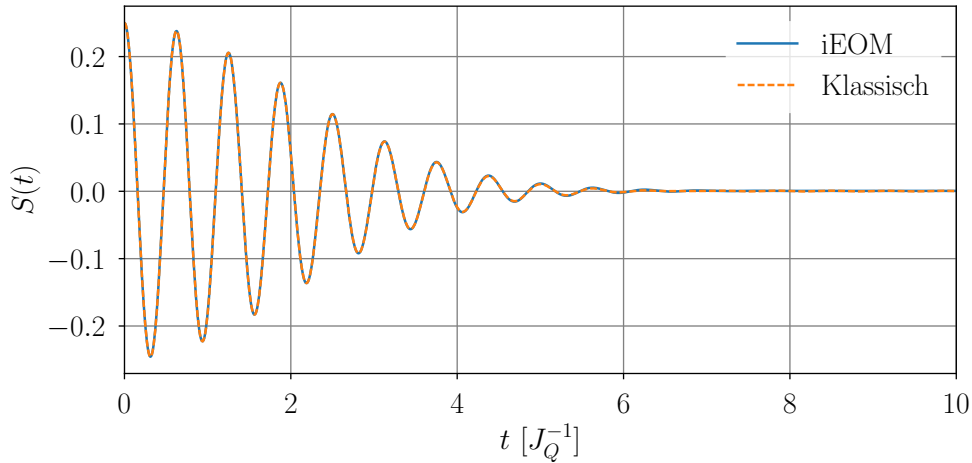


Abbildung 5.17: Vergleich einer klassischen Berechnung der Autokorrelationsfunktion für  $N = 499$  Spins (Abbildung 8 in Ref. [24]) mit einer Rechnung mit der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen für  $N = \infty$  Spins bei einer Magnetfeldstärke von  $h = 10J_Q$ . Es gilt  $n_{1,\max} = 51$  und  $n_{j,\max} = 0$  für  $j > 1$ .

## Kapitel 6

# Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird die vollständig quantenmechanische Berechnung von Autokorrelationsfunktionen der  $z$ -Komponente eines Spins  $S = 1/2$  im Zentralspinmodell untersucht. Das Aufstellen eines Bewegungsgleichungssystems für die Zeitentwicklung des Zentralspins geschieht dabei über die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen. Sie kann aus der Heisenberg-Gleichung abgeleitet werden und findet iterativ eine Basis mit der ein Zeitabhängiger Operator entwickelt werden kann. Über die entstehenden, zeitabhängigen Koeffizienten kann so ein Bewegungsgleichungssystem aufgestellt werden. Dazu sind zwei Voraussetzungen erforderlich. Zum einen muss ein Skalarprodukt definiert sein, was die Eigenschaft (3.8) erfüllt, damit keine exponentielle Divergenz auftritt. Dies ist in dieser Arbeit durch die Definition (3.9) gegeben. Zum Anderen müssen die Basisoperatoren orthonormal bezüglich dieses Skalarproduktes sein, um die Koeffizienten für das Bewegungsgleichungssystem zu bestimmen.

Es wird zunächst eine naive Basis untersucht, welche jedoch eine exakte Berechnung der Zeitentwicklung ermöglicht. Dabei sind die Basisoperatoren direkt durch die entstehenden Spinoperatorprodukte definiert. Die berechneten Autokorrelationen überlagern exakt mit den Resultaten einer vergleichbaren Rechnung über die Methode der DMRG [22]. Dabei skaliert jedoch die Anzahl der Basisoperatoren bei  $N$  Badspins mit  $\mathcal{O}(4^N)$ . Dadurch ist das zu lösende Bewegungsgleichungssystem schon für kleine Badgrößen  $N$  nur noch mit relativ großem Speicheraufkommen berechenbar. Der Speicherbedarf des Bewegungsgleichungssystems übersteigt die vorhandenen 256 GB RAM-Speicher schon bei  $N = 15$  betrachteten Kernspins. Der Versuch über eine Trunkierung größere Bäder zu betrachten ist fehlgeschlagen. Jedoch kann hier möglicherweise noch eine Verbesserung erzielt werden, indem die Relevanz der einzelnen Basisoperatoren genauer analysiert wird.

Es zeigt sich im Verlauf dieser Arbeit jedoch, dass eine effizientere Definition der Basisoperatoren die Größe des Bewegungsgleichungssystems signifikant reduziert. Diese neue Definition wird hier auf Grundlage der klassischen Lanczos-Methode aus Ref. [25] aufgestellt. Sie verfolgt die Idee, das Bad über eine Hierarchie von orthonormalen Feldern darzustellen. Die Hierarchie entsteht dabei durch orthonormale Polynome, welche über den bekannten Lanczos-Algorithmus [26] bestimmt werden. Die Felder fassen dabei

zuvor eigenständige Basisoperatoren in über die orthonormalen Polynome gewichtete Summen der Badspins zusammen und verringern so die Größe des zu lösenden Bewegungsgleichungssystems bei klassischen Rechnungen signifikant. Sie haben weiterhin die spezielle Eigenschaft sogar unendlich große Bäder zu beschreiben. Diese Methodik wird in dieser Arbeit in eine vollkommen quantenmechanische Betrachtung überführt.

Um alle nötigen Wechselwirkungen zu berücksichtigen sind zusätzlich höhere Potenzen der orthonormalen Felder, welche nun offensichtlich aus Spinoperatoren bestehen, notwendig. Sie können jedoch durch die Einführung von Hermite-Polynomen der Felder leicht bestimmen werden. Die Ergebnisse von Seifert *et al.* in Ref. [27] ermöglichen weiterhin die Spur der Felder in führender Ordnung in der effektiven Badgröße  $N_{\text{eff}}$  für große Bäder über Gaußkorrelationen zu bestimmen. Zusammen mit den Eigenschaften der Hermite-Polynome liefert dies die nötige Orthonormalität der Basisoperatoren. Die Überführung der Darstellung im Spinraum in einen Zustandsraum mit bosonischen Leiteroperatoren ermöglicht anschließend eine effiziente Beschreibung der Dynamik über einen effektiven Hamiltonoperator.

Mit der neuen Basis werden die Autokorrelationen des Zentralspins berechnet und die Ergebnisse untersucht. Da die effektive Badgröße  $N_{\text{eff}}$  nur über den Kopplungsparameter  $\gamma \approx 2/N_{\text{eff}}$  gesteuert wird, ist diese theoretisch nicht mehr nach oben begrenzt. Im Gegensatz zum naiven Ansatz steigt hier jedoch die Basisgröße mit der physikalisch korrekt berechenbaren Zeitspanne. Durch die effiziente Darstellung ist es trotzdem möglich mit den vorhandenen Ressourcen von 256 GB RAM-Speicher Zeiten von bis zu  $t = 45J_Q^{-1}$  zu erreichen. Dabei wird die maximale Anzahl der Bosonen in einer Stufe durch eine Trunkierung begrenzt. Da die korrekt berechenbare Zeit  $t_{\text{max}}$  von den Trunkierungsgrenzen aller hierarchischen Stufen  $j$  abhängt, werden im Laufe dieser Arbeit Skalierungsfunktionen für optimale Konfigurationen dieser Grenzen bestimmt.

Beim Vergleich mit einer Lösung über DMRG ist eine deutliche Verbesserung zur äquivalenten klassischen Methode zu erkennen. Die Unterschiede zur DMRG können einer zu großen Wahl des Faktors  $\gamma = 10^{-2}$  geschuldet sein, da die genutzten Approximationen nur für große effektive Bäder gelten. Um den Verlauf der Autokorrelation über die maximal erreichbare Zeit der DMRG hinaus zu betrachten, wird ebenfalls mit einer CET-Berechnung [14] verglichen. Da diese nur  $N = 18$  Spins beschreibt, ist der Parameter  $\gamma = 1/18$  noch größer als zuvor. Es sind dieselben anfänglichen Abweichungen wie bei der DMRG in etwas stärkerer Ausprägung zu sehen. Das spricht für die Vermutung eines zu großen Wertes für  $\gamma$ . Jedoch ist ab  $t \approx 15J_Q^{-1}$  eine sehr gute Übereinstimmung zu verzeichnen, was darauf hindeutet, dass das Langzeitverhalten über die approximative Basis korrekt beschrieben wird.

Zum Abschluss wird der Einfluss eines Magnetfeldes, welches lediglich auf den Zentralspin wirkt, betrachtet. Für hinreichend große Magnetfelder ist eine exakte Übereinstimmung der iterierten Bewegungsgleichungen mit der DMRG vorhanden. Auch ein Vergleich mit einer klassischen Berechnung der Autokorrelation mit den linearen Kopplungskonstanten (2.11) zeigt keine Abweichungen.

Die Übertragung der klassischen Lanczos-Methode in Ref. [25], in eine voll quantenmechanische Betrachtung mithilfe der Ergebnisse aus Ref. [27], liefert demnach nun

---

die Möglichkeit längere Zeiten als zum Beispiel die DMRG bei sehr großen und sogar unendlichen Spinbädern zu beschreiben. Weitere Forschungsmöglichkeiten mit dieser Methode sind zum Beispiel durch das Hinzunehmen von Pulssequenzen gegeben [10]. Bei der Betrachtung des Magnetfeldes wurde außerdem die Wechselwirkung mit den Kernspins nicht betrachtet. Um noch größere Zeiten zu betrachten können ebenfalls noch weitere Überlegungen zu einer effizienteren Darstellung des Hilbertraumes angestellt werden.

Weiterhin zeigen unter anderem aktuelle Experimente, dass eine Betrachtung von Autokorrelationsfunktionen höherer Ordnungen ebenfalls von Interesse sind. Bechtold *et al.* haben in Experimenten iterierte Messungen durchgeführt [37], die unter anderem mit Spinkorrelationen vierter Ordnung in Verbindung gebracht werden können [38]. Von Press *et al.* wurden außerdem Experimente mit einer Spin-Echo-Methode durchgeführt [39], deren Messungen ebenfalls auf eine Autokorrelationsfunktion vierter Ordnung zurückzuführen sind. Damit können weitere quantenmechanische Effekte untersucht werden, welche durch die hier betrachtete Autokorrelationsfunktion nicht zugänglich sind.



## Anhang A

# Approximative Basisentwicklung für große Bäder

### A.1 Leiteroperatoren der Hermite-Polynome

Für den Vernichtungsoperator gilt

$$\hat{a} |n\rangle \hat{=} \left( \frac{x}{2} + \frac{\partial}{\partial x} \right) H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.1a})$$

$$= \frac{x}{2} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} + H'_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} - \frac{x}{2} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.1b})$$

$$= \sqrt{n} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.1c})$$

$$\hat{=} \sqrt{n} |n-1\rangle \quad . \quad (\text{A.1d})$$

Für den Erzeugungsoperator gilt

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle \hat{=} \left( \frac{x}{2} - \frac{\partial}{\partial x} \right) H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.2a})$$

$$= \frac{x}{2} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} - H'_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} + \frac{x}{2} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.2b})$$

$$= x H_n(x) e^{-\frac{x^2}{4}} - \sqrt{n} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.2c})$$

$$= \sqrt{n+1} H_{n+1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} + \sqrt{n} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} - \sqrt{n} H_{n-1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.2d})$$

$$= \sqrt{n+1} H_{n+1}(x) e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (\text{A.2e})$$

$$\hat{=} \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad . \quad (\text{A.2f})$$

## A.2 Direkte Zeitentwicklung

Es wird im Folgenden die direkte Zeitentwicklung

$$\langle S_0^z(t) S_0^z(0) \rangle = \frac{1}{4} \langle \sigma_3 | \exp(-it\hat{H}_{\text{eff}}) | \sigma_3 \rangle \quad (\text{A.3a})$$

$$= \frac{1}{4} \sum_n \frac{(-it)^n}{n!} \langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^n | \sigma_3 \rangle \quad (\text{A.3b})$$

betrachtet. Dabei gilt

$$|\sigma_3\rangle = |3; 000; 0.. \rangle \quad , \quad (\text{A.4})$$

wobei die Zustände die Stufen Stufe  $j > 1$  nur ausgeschrieben, wenn  $n_{j,\alpha} \neq 0$  gilt.

### A.2.1 0. Ordnung

$$\langle A(0)A(0) \rangle_0 = \frac{1}{4} \langle \sigma_z | \sigma_z \rangle = \frac{1}{4} \quad (\text{A.5})$$

### A.2.2 1. und 2. Ordnung

Die einmalige Anwendung des effektiven Hamilton Operators auf den Startzustand ergibt

$$\hat{H}_{\text{eff}} |\sigma_3\rangle = -\frac{i}{2} |2; 100\rangle + \frac{i}{2} |1; 010\rangle \quad . \quad (\text{A.6})$$

Damit ist die erste Ordnung offensichtlich

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}} | \sigma_3 \rangle = -\frac{i}{2} \langle 3; 000 | 2; 100 \rangle + \frac{i}{2} \langle 3; 000 | 1; 010 \rangle = 0 \quad . \quad (\text{A.7})$$

Für die zweite Ordnung gilt

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^2 | \sigma_3 \rangle = \frac{1}{4} \langle \sigma_z | HH | \sigma_z \rangle \quad (\text{A.8a})$$

$$= \frac{1}{4} \left( \frac{i}{2} \langle 2100 | - \frac{i}{2} \langle 1010 | \right) \left( -\frac{i}{2} | 2100 \rangle + \frac{i}{2} | 1010 \rangle \right) \quad (\text{A.8b})$$

$$= \frac{1}{4} \left( -\left(\frac{i}{2}\right)^2 - \left(\frac{i}{2}\right)^2 \right) \quad (\text{A.8c})$$

$$= \frac{1}{4} \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) \quad (\text{A.8d})$$

$$= \frac{1}{8} \quad . \quad (\text{A.8e})$$

### A.2.3 3. und 4. Ordnung

Die Berechnung der zweifachen Anwendung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  ergibt damit

$$\hat{H}_{\text{eff}}^2 |\sigma_z\rangle = -\frac{i}{2} \hat{H}_{\text{eff}} |2; 100\rangle + \frac{i}{2} \hat{H}_{\text{eff}} |1; 010\rangle \quad (\text{A.9a})$$

$$= -\frac{i}{2} \left( \frac{i}{2} |3; 000\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |3; 200\rangle \right. \quad (\text{A.9b})$$

$$\left. -\frac{i}{2} |1; 101\rangle + i\frac{\alpha_1}{2} |0; 001\rangle + i\frac{\beta_1}{2} |0; 000; 001\rangle \right) \quad (\text{A.9c})$$

$$+ \frac{i}{2} \left( -\frac{i}{2} |3; 000\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |3; 020\rangle \right. \quad (\text{A.9d})$$

$$\left. + \frac{i}{2} |2; 011\rangle - i\frac{\alpha_1}{2} |0; 001\rangle - i\frac{\beta_1}{2} |0; 000; 001\rangle \right) \quad (\text{A.9e})$$

$$= \frac{1}{2} |3; 000\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |3; 200\rangle - \frac{1}{4} |1; 101\rangle + \frac{\alpha_1}{2} |0; 001\rangle \quad (\text{A.9f})$$

$$+ \frac{1}{2\sqrt{2}} |3; 020\rangle - \frac{1}{4} |2; 011\rangle + \frac{\beta_1}{2} |0; 000; 001\rangle \quad (\text{A.9g})$$

Bei der zweifachen Anwendung von  $\hat{H}_{\text{eff}}$  wird das erste mal die Auswirkung des unmodifizierten Multiplikationsoperators (5.42) in  $\hat{H}_{\text{eff}}$  deutlich. Es entstehen die zusätzlichen Terme

$$-\frac{i}{2} \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{mod}} |2; 100\rangle = -\frac{i}{2} \left( -\frac{\alpha_1}{2} |1; 010\rangle - \frac{\beta_1}{2} |1; 000; 010\rangle \right) \quad (\text{A.10a})$$

und

$$\frac{i}{2} \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{mod}} |1; 010\rangle = \frac{i}{2} \left( -\frac{\alpha_1}{2} |2; 100\rangle - \frac{\beta_1}{2} |2; 000; 100\rangle \right) \quad (\text{A.10b})$$

Dabei enthält  $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{mod}}$  nur den Imaginärteil des Multiplikationsoperators (5.42). Es ist offensichtlich, dass

$$\frac{1}{4} \left( \frac{i}{2} \langle 2100| - \frac{i}{2} \langle 1010| \right) \hat{H}_{\text{eff}}^2 |3; 000\rangle = 0 \quad (\text{A.11})$$

gilt. Jedoch liefern die zusätzlichen Terme mit der unmodifizierten Definition des Multiplikationsoperators

$$\frac{1}{4} \left( \frac{i}{2} \langle 2100| - \frac{i}{2} \langle 1010| \right) \left( \frac{i\alpha_1}{4} |1; 010\rangle - \frac{i\alpha_1}{4} |2; 100\rangle \right) = \frac{\alpha_1}{16} \neq 0 \quad (\text{A.12})$$

Dies erklärt die in Kapitel 5.4.4 erläuterte Problematik.

Wird nun wieder ausschließlich die modifizierte Definition des Multiplikationsoperators (5.67) betrachtet, so gilt für die 4. Ordnung

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^4 | \sigma_3 \rangle = \frac{1}{4} \left( \left( \frac{1}{2} \right)^2 + 2 \left( \frac{1}{2\sqrt{2}} \right)^2 + 2 \left( \frac{1}{4} \right)^2 + \left( \frac{\alpha_1}{2} \right)^2 + \left( \frac{\beta_1}{2} \right)^2 \right) \quad (\text{A.13a})$$

$$= \frac{1}{4} \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{\alpha_1^2}{4} + \frac{\beta_1^2}{4} \right) \quad (\text{A.13b})$$

$$= \frac{1}{4} \left( \frac{5}{8} + \frac{\alpha_1^2}{4} + \frac{\beta_1^2}{4} \right) \quad (\text{A.13c})$$

$$= \frac{5}{32} + \frac{\alpha_1^2 + \beta_1^2}{16} . \quad (\text{A.13d})$$

#### A.2.4 6. Ordnung

Abschließend wird das Ergebnis der 4. Ordnung genutzt und erneut der effektive Hamilton-Operator angewendet. Dies wird zunächst nur für die einzelnen Operatoren durchgeführt:

$$\hat{H}_{\text{eff}} |3; 000\rangle = -\frac{i}{2} |2; 100\rangle + \frac{i}{2} |1; 010\rangle \quad (\text{A.14})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |3; 200\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |2; 100\rangle - i \frac{\sqrt{3}}{2} |2; 300\rangle + \frac{i}{2} |1; 210\rangle \quad (\text{A.15a})$$

$$- i \frac{\alpha_1}{\sqrt{2}} |0; 110\rangle - i \frac{\beta_1}{\sqrt{2}} |0; 100; 010\rangle \quad (\text{A.15b})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |1; 101\rangle = -\frac{i}{2} |3; 111\rangle + \frac{i}{2} |2; 100\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |2; 102\rangle \quad (\text{A.16a})$$

$$+ i \frac{\alpha_1}{2} |0; 110\rangle + i \frac{\beta_1}{2} |0; 100; 010\rangle \quad (\text{A.16b})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |0; 001\rangle = i \frac{\alpha_1}{2} |1; 010\rangle + i \frac{\beta_1}{2} |1; 000; 010\rangle \quad (\text{A.17a})$$

$$- i \frac{\alpha_1}{2} |2; 100\rangle - i \frac{\beta_1}{2} |2; 000; 100\rangle \quad (\text{A.17b})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |0; 000; 001\rangle = i \frac{\beta_1}{2} |1; 010\rangle + i \frac{\alpha_2}{2} |1; 000; 010\rangle \quad (\text{A.18a})$$

$$+ i \frac{\beta_2}{2} |1; 000; 000; 010\rangle - i \frac{\beta_1}{2} |2; 100\rangle \quad (\text{A.18b})$$

$$- i \frac{\alpha_2}{2} |2; 000; 100\rangle - i \frac{\beta_2}{2} |2; 000; 000; 100\rangle \quad (\text{A.18c})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |3; 020\rangle = -\frac{i}{2} |2; 120\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |1; 010\rangle + i\frac{\sqrt{3}}{2} |1; 030\rangle \quad (\text{A.19a})$$

$$+ i\frac{\alpha_1}{\sqrt{2}} |0; 110\rangle + i\frac{\beta_1}{\sqrt{2}} |0; 010; 100\rangle \quad (\text{A.19b})$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} |2; 011\rangle = \frac{i}{2} |3; 111\rangle - \frac{i}{2} |1; 010\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |1; 012\rangle \quad (\text{A.20a})$$

$$- i\frac{\alpha_1}{2} |0; 110\rangle - i\frac{\beta}{2} |0; 010; 100\rangle \quad (\text{A.20b})$$

Zusammengefasst gilt dann

$$\hat{H}_{\text{eff}}^3 |\sigma_3\rangle = \frac{1}{2} \left( -\frac{i}{2} |2; 100\rangle + \frac{i}{2} |1; 010\rangle \right) \quad (\text{A.21a})$$

$$+ \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{i}{\sqrt{2}} |2; 100\rangle - i\frac{\sqrt{3}}{2} |2; 300\rangle + \frac{i}{2} |1; 210\rangle \right) \quad (\text{A.21b})$$

$$- i\frac{\alpha_1}{\sqrt{2}} |0; 110\rangle - i\frac{\beta_1}{\sqrt{2}} |0; 100; 010\rangle \quad (\text{A.21c})$$

$$- \frac{1}{4} \left( -\frac{i}{2} |3; 111\rangle + \frac{i}{2} |2; 100\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |2; 102\rangle \right) \quad (\text{A.21d})$$

$$+ i\frac{\alpha_1}{2} |0; 110\rangle + i\frac{\beta_1}{2} |0; 100; 010\rangle \quad (\text{A.21e})$$

$$+ \frac{\alpha_1}{2} \left( i\frac{\alpha_1}{2} |1; 010\rangle + i\frac{\beta_1}{2} |1; 000; 010\rangle \right) \quad (\text{A.21f})$$

$$- i\frac{\alpha_1}{2} |2; 100\rangle - i\frac{\beta_1}{2} |2; 000; 100\rangle \quad (\text{A.21g})$$

$$+ \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( -\frac{i}{2} |2; 120\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |1; 010\rangle + i\frac{\sqrt{3}}{2} |1; 030\rangle \right) \quad (\text{A.21h})$$

$$+ i\frac{\alpha_1}{\sqrt{2}} |0; 110\rangle + i\frac{\beta_1}{\sqrt{2}} |0; 010; 100\rangle \quad (\text{A.21i})$$

$$- \frac{1}{4} \left( \frac{i}{2} |3; 111\rangle - \frac{i}{2} |1; 010\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |1; 012\rangle \right) \quad (\text{A.21j})$$

$$- i\frac{\alpha_1}{2} |0; 110\rangle - i\frac{\beta_1}{2} |0; 010; 100\rangle \quad (\text{A.21k})$$

$$+ \frac{\beta_1}{2} \left( i\frac{\beta_1}{2} |1; 010\rangle + i\frac{\alpha_2}{2} |1; 000; 010\rangle \right) \quad (\text{A.21l})$$

$$+ i\frac{\beta_2}{2} |1; 000; 000; 010\rangle - i\frac{\beta_1}{2} |2; 100\rangle \quad (\text{A.21m})$$

$$- i\frac{\alpha_2}{2} |2; 000; 100\rangle - i\frac{\beta_2}{2} |2; 000; 000; 100\rangle \quad (\text{A.21n})$$

Nach Addition gleicher Basis-Operatoren:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^3 |\sigma_z\rangle = \left( -\frac{i}{4} - \frac{i}{4} - \frac{i}{8} - i\frac{\alpha_1^2}{4} - i\frac{\beta_1^2}{4} \right) |2; 100\rangle \quad (\text{A.22a})$$

$$+ \left( \frac{i}{4} + i\frac{\alpha_1^2}{4} + \frac{i}{4} + \frac{i}{8} + i\frac{\beta_1^2}{4} \right) |1; 010\rangle - i\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} |2; 300\rangle + i\frac{1}{4\sqrt{2}} |1; 210\rangle \quad (\text{A.22b})$$

$$+ \left( -i\frac{\alpha_1}{4} + i\frac{\alpha_1}{4} - i\frac{\alpha_1}{8} + i\frac{\alpha_1}{8} \right) |0; 110\rangle \quad (\text{A.22c})$$

$$+ \left( -i\frac{\beta_1}{4} - i\frac{\beta_1}{8} \right) |0; 100; 010\rangle \quad (\text{A.22d})$$

$$+ \left( \frac{i}{8} - \frac{i}{8} \right) |3; 111\rangle - \frac{i}{4\sqrt{2}} |2; 102\rangle \quad (\text{A.22e})$$

$$+ \left( -i\frac{\alpha_1\beta_1}{4} + i\frac{\beta_1\alpha_2}{4} \right) |1; 000; 010\rangle + i\frac{\beta_1\beta_2}{4} |1; 000; 000; 010\rangle \quad (\text{A.22f})$$

$$+ \left( -i\frac{\alpha_1\beta_1}{4} - i\frac{\beta_1\alpha_2}{4} \right) |2; 000; 100\rangle - i\frac{\beta_1\beta_2}{4} |2; 000; 000; 100\rangle \quad (\text{A.22g})$$

$$- \frac{i}{4\sqrt{2}} |2; 120\rangle + i\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} |1; 030\rangle \quad (\text{A.22h})$$

$$+ \left( i\frac{\beta_1}{4} + i\frac{\beta_1}{8} \right) |0; 010; 100\rangle + \frac{i}{4\sqrt{2}} |1; 012\rangle \quad (\text{A.22i})$$

$$= -i \left( \frac{5}{8} + \frac{\alpha_1^2 + \beta_1^2}{4} \right) |2; 100\rangle \quad (\text{A.22j})$$

$$+ i \left( \frac{5}{8} + \frac{\alpha_1^2 + \beta_1^2}{4} \right) |1; 010\rangle - i\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} |2; 300\rangle \quad (\text{A.22k})$$

$$+ \frac{i}{4\sqrt{2}} |1; 210\rangle - 3i\frac{\beta_1}{8} |0; 100; 010\rangle - \frac{i}{4\sqrt{2}} |2; 102\rangle \quad (\text{A.22l})$$

$$+ \left( i\frac{\alpha_1\beta_1}{4} + i\frac{\beta_1\alpha_2}{4} \right) |1; 000; 010\rangle + i\frac{\beta_1\beta_2}{4} |1; 000; 000; 010\rangle \quad (\text{A.22m})$$

$$+ \left( -i\frac{\alpha_1\beta_1}{4} - i\frac{\beta_1\alpha_2}{4} \right) |2; 000; 100\rangle - i\frac{\beta_1\beta_2}{4} |2; 000; 000; 100\rangle \quad (\text{A.22n})$$

$$- \frac{i}{4\sqrt{2}} |2; 120\rangle + i\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} |1; 030\rangle \quad (\text{A.22o})$$

$$+ 3i\frac{\beta_1}{8} |0; 010; 100\rangle + \frac{i}{4\sqrt{2}} |1; 012\rangle \quad (\text{A.22p})$$

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^6 | \sigma_3 \rangle = 2 \left( \frac{5}{8} + \frac{\alpha_1^2 + \beta_1^2}{4} \right)^2 + 2 \left( \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}} \right)^2 + 4 \left( \frac{1}{4\sqrt{2}} \right)^2 + 2 \left( \frac{3\beta_1}{8} \right)^2 \quad (\text{A.23a})$$

$$+ 2 \left( \frac{\alpha_1\beta_1}{4} + \frac{\beta_1\alpha_2}{4} \right)^2 + 2 \left( \frac{\beta_1\beta_2}{4} \right)^2 \quad (\text{A.23b})$$

$$= \frac{\alpha_1^4 + 2\alpha_1^2\beta_1^2 + \beta_1^4}{8} + \frac{5(\alpha_1^2 + \beta_1^2)}{8} + \frac{25}{32} \quad (\text{A.23c})$$

$$+ \frac{3}{16} + \frac{1}{8} + \frac{9\beta_1^2}{32} + \frac{\beta_1^2}{8}(\alpha_1 + \alpha_2)^2 + \frac{\beta_1^2\beta_2^2}{8} \quad (\text{A.23d})$$

$$= \frac{(\alpha_1^2 + \beta_1^2)^2}{8} + \frac{5(\alpha_1^2 + \beta_1^2)}{8} + \frac{35}{32} + \frac{9\beta_1^2}{32} + \frac{\beta_1^2}{8}(\alpha_1 + \alpha_2)^2 + \frac{\beta_1^2\beta_2^2}{8} \quad (\text{A.23e})$$

Das finale Ergebnis lautet

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^6 | \sigma_3 \rangle = \frac{(\alpha_1^2 + \beta_1^2)^2}{32} + \frac{5(\alpha_1^2 + \beta_1^2)}{32} + \frac{35}{128} + \frac{9\beta_1^2}{128} + \frac{\beta_1^2}{32}(\alpha_1 + \alpha_2)^2 + \frac{\beta_1^2\beta_2^2}{32} \quad (\text{A.24})$$

$$\alpha_n = \frac{4n^2}{4n^2 - 1} \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \quad (\text{A.25a})$$

$$\beta_n = \frac{\sqrt{n(n+1)}}{2n+1} \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \quad (\text{A.25b})$$

$$\langle \sigma_3 | \hat{H}_{\text{eff}}^6 | \sigma_3 \rangle = \frac{1}{24}\gamma^2 + \frac{21}{128}\gamma + \frac{35}{128} \quad (\text{A.26a})$$



# Quellenverzeichnis

- [1] P. W. Shor, „Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring“, in Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science (Nov. 1994), S. 124–134.
- [2] P. W. Shor, „Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer“, SIAM Journal on Computing **26**, 1484 (1997).
- [3] L. K. Grover, „Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack“, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
- [4] D. P. DiVincenzo, „The physical implementation of quantum computation“, Fortschr. Phys **48**, 771 (2000).
- [5] D. Loss und D. P. DiVincenzo, „Quantum computation with quantum dots“, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [6] J. Schliemann, A. Khaetskii und D. Loss, „Electron spin dynamics in quantum dots and related nanostructures due to hyperfine interaction with nuclei“, Journal of Physics: Condensed Matter **15**, R1809 (2003).
- [7] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha und L. M. K. Vandersypen, „Spins in few-electron quantum dots“, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [8] B. Urbaszek, X. Marie, T. Amand, O. Krebs, P. Voisin, P. Maletinsky, A. Högele und A. Imamoglu, „Nuclear spin physics in quantum dots: an optical investigation“, Rev. Mod. Phys. **85**, 79 (2013).
- [9] A. Greilich, D. R. Yakovlev, A. Shabaev, A. L. Efros, I. A. Yugova, R. Oulton, V. Stavarache, D. Reuter, A. D. Wieck und M. Bayer, „Mode locking of electron spin coherences in singly charged quantum dots“, Science **313**, 341 (2006).
- [10] G. S. Uhrig, „Keeping a quantum bit alive by optimized  $\pi$ -pulse sequences“, Phys. Rev. Lett. **98**, 100504 (2007).
- [11] I. A. Merkulov, A. L. Efros und M. Rosen, „Electron spin relaxation by nuclei in semiconductor quantum dots“, Phys. Rev. B **65**, 205309 (2002).
- [12] Gaudin, M., „Diagonalisation d’une classe d’hamiltoniens de spin“, J. Phys. France **37**, 1087 (1976).
- [13] M. Gaudin, *La fonction d’onde de bethe* (Masson, 1983).

- [14] J. Hackmann und F. B. Anders, „Spin noise in the anisotropic central spin model“, *Phys. Rev. B* **89**, 045317 (2014).
- [15] H. Tal-Ezer und R. Kosloff, „An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent schrödinger equation“, *The Journal of Chemical Physics* **81**, 3967 (1984).
- [16] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann und H. Fehske, „The kernel polynomial method“, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 275 (2006).
- [17] M. Bortz und J. Stolze, „Exact dynamics in the inhomogeneous central-spin model“, *Phys. Rev. B* **76**, 014304 (2007).
- [18] A. Faribault und D. Schuricht, „Integrability-based analysis of the hyperfine-interaction-induced decoherence in quantum dots“, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 040405 (2013).
- [19] A. Faribault und D. Schuricht, „Spin decoherence due to a randomly fluctuating spin bath“, *Phys. Rev. B* **88**, 085323 (2013).
- [20] S. Lee, P. von Allmen, F. Oyafuso, G. Klimeck und K. B. Whaley, „Effect of electron-nuclear spin interactions for electron-spin qubits localized in ingaas self-assembled quantum dots“, *Journal of Applied Physics* **97**, 043706 (2005).
- [21] M. Y. Petrov, I. V. Ignatiev, S. V. Poltavtsev, A. Grelich, A. Bauschulte, D. R. Yakovlev und M. Bayer, „Effect of thermal annealing on the hyperfine interaction in inas/gaas quantum dots“, *Phys. Rev. B* **78**, 045315 (2008).
- [22] D. Stanek, C. Raas und G. S. Uhrig, „Dynamics and decoherence in the central spin model in the low-field limit“, *Phys. Rev. B* **88**, 155305 (2013).
- [23] L. B. Gravert, P. Lorenz, C. Nase, J. Stolze und G. S. Uhrig, „Increased coherence time in narrowed bath states in quantum dots“, *Phys. Rev. B* **94**, 094416 (2016).
- [24] D. Stanek, C. Raas und G. S. Uhrig, „From quantum-mechanical to classical dynamics in the central-spin model“, *Phys. Rev. B* **90**, 064301 (2014).
- [25] B. Fauseweh, P. Schering, J. Hüdepohl und G. S. Uhrig, „Efficient algorithms for the dynamics of large and infinite classical central spin models“, *Phys. Rev. B* **96**, 054415 (2017).
- [26] 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).
- [27] U. Seifert, P. Bleicker, P. Schering, A. Faribault und G. S. Uhrig, „Persisting correlations of a central spin coupled to large spin baths“, *Phys. Rev. B* **94**, 094308 (2016).
- [28] W. Beugeling, G. S. Uhrig und F. B. Anders, „Influence of the nuclear zeeman effect on mode locking in pulsed semiconductor quantum dots“, *Phys. Rev. B* **96**, 115303 (2017).

- [29] W. A. Coish und D. Loss, „Hyperfine interaction in a quantum dot: non-markovian electron spin dynamics“, Phys. Rev. B **70**, 195340 (2004).
- [30] G. Chen, D. L. Bergman und L. Balents, „Semiclassical dynamics and long-time asymptotics of the central-spin problem in a quantum dot“, Phys. Rev. B **76**, 045312 (2007).
- [31] A. Greilich, S. E. Economou, S. Spatzek, D. R. Yakovlev, D. Reuter, A. D. Wieck, T. L. Reinecke und M. Bayer, „Ultrafast optical rotations of electron spins in quantum dots“, Nat Phys **5**, 262 (2009).
- [32] A. Khaetskii, D. Loss und L. Glazman, „Electron spin evolution induced by interaction with nuclei in a quantum dot“, Phys. Rev. B **67**, 195329 (2003).
- [33] M. Kalthoff, F. Keim, H. Krull und G. S. Uhrig, „Comparison of the iterated equation of motion approach and the density matrix formalism for the quantum rabi model“, The European Physical Journal B **90**, 97 (2017).
- [34] L. Isserlis, „On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables“, Biometrika **12**, 134 (1918).
- [35] G. C. Wick, „The evaluation of the collision matrix“, Phys. Rev. **80**, 268 (1950).
- [36] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig, *Taschenbuch der mathematik*, 7. Aufl. (Verlag Harri Deutsch, 2008), S. 572.
- [37] A. Bechtold, F. Li, K. Müller, T. Simmet, P.-L. Ardelt, J. J. Finley und N. A. Sinitsyn, „Quantum effects in higher-order correlators of a quantum-dot spin qubit“, Phys. Rev. Lett. **117**, 027402 (2016).
- [38] N. Fröhling und F. B. Anders, „Long-time coherence in fourth-order spin correlation functions“, Phys. Rev. B **96**, 045441 (2017).
- [39] D. Press, K. De Greve, P. L. McMahon, T. D. Ladd, B. Friess, C. Schneider, M. Kamp, S. Hofling, A. Forchel und Y. Yamamoto, „Ultrafast optical spin echo in a single quantum dot“, Nat Photon **4**, 367 (2010).

## **Danksagung**

Zuerst möchte ich mich bei Prof. Dr. Götz Uhrig für die hervorragende Betreuung dieser Arbeit bedanken. Außerdem danke ich Lars Gravert und Philipp Schering die mir jederzeit für Fragen und Diskussionen zur Verfügung standen. Auch Benedikt Fauseweh gilt mein Dank, der vor allem in der Anfangsphase ebenfalls einen Teil der Betreuung übernommen hat. Weiterhin danke ich Prof. Dr. Frithjof Anders für die Übernahme der Zweitkorrektur.

Besonderer Dank gilt meiner Familie, die mich immer unterstützt und mein Studium erst ermöglicht hat. Ebenso danke ich meiner Freundin Alexandra Baglikow für ihre Unterstützung und Geduld während der letzten Monate.

## Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel "Quantenmechanische Berechnung von Autokorrelationsfunktionen im Zentral-spinmodell für unendlich große Spinbäder" 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 € 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