

Dekohärenz im allgemeinen Spin-Boson-Modell im klassischen Limes

Masterarbeit
zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science

vorgelegt von
Lars Benjamin Gravert
geboren in Dortmund

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund
2013

1. Gutachter : Prof. Dr. Götz S. Uhrig
2. Gutachter : Prof. Dr. Joachim Stolze

Datum des Einreichens der Arbeit: 30. September 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Physikalische Grundlagen	3
2.1	Modell	3
2.1.1	Freies System	4
2.1.2	Wechselwirkung mit der Umgebung	5
2.2	Spinkorrelationen	7
2.2.1	Zeitentwicklung	8
2.2.2	Zeitabhängige Operatoren	10
2.2.3	Wechselwirkungsbild	11
2.2.4	Mittelung	12
2.2.5	Definition von parallen und normalen Spinvektoren	13
3	Mathematische Grundlagen	15
3.1	Spinalgebra	15
3.1.1	Abgeleitete Formeln	16
3.2	Fluktuationen und Zufallszahlen	17
3.2.1	Effektive Fluktutationen	18
3.3	Magnus-Entwicklung	19
3.4	Frobeniusnorm	22
4	Spezialfälle und Grundlagen	23
4.1	Verschwindene Störung	23
4.2	Externes Feld	25
4.2.1	Verschwindendes externes Feld	25
4.2.2	Rein transversales Feld	26
4.3	Konstantes Rauschen	28
4.4	Grundlagen für den allgemeinen Fall	33
4.4.1	Berechnung der Korrelationsmatrix	34
4.4.2	Näherungslösung der Korrelationsmatrix für kleine Zeiten	35
4.4.3	Effektive Korrelationsmatrix	36

5	Lösung mithilfe der Magnus-Entwicklung	38
5.1	Näherung des Zeitentwicklungsoperators	38
5.2	Berechnung der Korrelationen	39
5.3	Eigenschaften der effektiven Fluktuationen	40
5.4	Berechnung der Mittelungen	43
5.4.1	Berechnung in Diagonalbasis	44
5.4.2	Berechnung in Kugelkoordinaten	46
5.4.3	Unterschiede zwischen den Methoden	48
5.5	Spezialfälle	49
5.5.1	Transversales Feld	50
5.5.2	Longitudinales Feld	51
5.5.3	Konstante Korrelationsfunktion	52
5.6	Spinkorrelationen in der Magnus-Entwicklung	54
5.6.1	Untersuchte Korrelationen	54
5.6.2	Parameterabhängigkeit der Korrelationen	59
5.6.3	Grenzen der Magnus-Entwicklung	62
6	Lösung durch numerische Simulation	65
6.1	Simulierte Größen	65
6.2	Kommutatorfreie exponentielle Zeitentwicklung	66
6.3	Fluktuierende Zufallszahl	67
6.4	Numerische Fehlerquellen	69
6.5	Vergleich mit bekannten Ergebnissen	69
6.6	Spinkorrelation in der numerischen Simulation	72
6.6.1	Parameterabhängigkeit der Kreuzkorrelationen	72
6.6.2	Verhalten für große Zeiten und starke Kopplungen	75
7	Vergleich	78
7.1	Differenzmatrix und Frobeniusnorm	78
7.2	Analyse der Frobeniusnorm	78
7.3	Analyse der Matrixelemente	82
8	Zusammenfassung und Ausblick	83
A	Konventionen und Formeln	85
A.1	Konventionen	85
A.1.1	Wichtige Funktionen	85
A.1.2	Konventionen in der lineare Algebra	86
A.1.3	Kommutatoren	86
A.2	Formelsammlung	87
A.2.1	Mittelwert vom Kosinus	87
A.2.2	Partielle Integration in der Diagonalbasis	87
A.2.3	Integralrelationen der trigonometrischen Funktionen	88

B	Formeln der Paulimatrizen	89
C	Analytischen Näherungslösung	92
D	Hilfsintegrale	94
D.1	Relationen zwischen den Hilfsintegralen	94
D.2	Integrale für exponentiell zerfallende Autokorrelationsfunktionen	95
	Quellenverzeichnis	96

Kapitel 1

Einleitung

Die Dynamik eines Spins, der mit seiner Umgebung wechselwirkt, ist experimentell wie theoretisch ein wichtiges Gebiet der Festkörperphysik. Seit über 20 Jahren wird an einer theoretischen Beschreibung für solche Systeme gearbeitet. Dabei ist ein Ziel der Forschung die gezielte Manipulation und Speicherung von Zuständen im System. Dies ist die Grundlage für einen Quantencomputer, deren theoretische Grundlagen in Referenz [1] dargestellt werden. Allerdings sind die Lebenszeiten von gespeicherten Zuständen durch die Dekohärenz des Systems stark beschränkt. Als Dekohärenz kann der Zerfall von Korrelationsfunktionen verstanden werden.

Die Dekohärenz ist eine Folge der Wechselwirkung zwischen dem betrachteten Spin und seiner Umgebung. Daher besteht eine wesentliche Aufgabe der theoretischen Physik darin, die Auswirkungen der Dekohärenz mathematisch zu modellieren, um die realen Systeme geeignet zu beschreiben. Durch ein tiefer gehendes Verständnis der Dekohärenz können Methoden gefunden werden, die Lebenszeit von einem Quantenbit zu erhöhen, zum Beispiel durch geeignete Pulssequenzen wie in den Referenzen [2] und [3].

In der Literatur ist das Spin-Boson-Modell lange diskutiert. Eine grundlegende Einführung in das Modell wird in Referenz [4] vorgestellt, in der gezeigt wird, dass sich jedes verallgemeinerte Zweiniveausystem mit dem Modell beschreiben lässt. Die Umgebung wird hier durch bosonische Freiheitsgrade beschrieben, die an den Zentralspin gekoppelt sind. Neben der Verwendung für Quantenpunkte wird dieses Modell für eine Vielzahl weiterer physikalischer Probleme genutzt. Als Beispiele werden in den Referenzen [4] und [5] mehrere Anwendungen genannt wie zum Beispiel chemische Reaktionen in Festkörpern. Ein weiteres typisches Beispiel ist die Beschreibung der Dynamik von Kernspins mit $S = \frac{1}{2}$, die durch gezielte Manipulation und Wechselwirkung mit der Umgebung des Atoms bestimmt wird. Referenz [6] gibt eine umfangreiche Einführung in dieses grundlegende Gebiet der Festkörperphysik. Das Modell hat also definitiv über die Implementierung eines Quantencomputer beziehungsweise die Beschreibung von Dekohärenz hinaus weitere wichtige Anwendungsmöglichkeiten.

Trotz der vielen Arbeiten ist das allgemeine Spin-Boson-Modell nicht analytisch gelöst. Tatsächlich basieren die Rechnungen auf numerischen Methoden wie zum Beispiel der numerischen Renormierungsgruppe, die in Referenz [7] vorgestellt wird. Diese sind re-

lativ aufwändig, so dass nach einer einfacheren Beschreibung gesucht werden soll. Die wesentliche Erkenntnis aus den Rechnungen ist der Abfall der Kohärenz im gekoppelten Zentralspinsystem. Ein alternatives Modell muss also den Zerfall der Spinkorrelationen korrekt beschreiben.

An Stelle einer quantenmechanischen Modellierung der Umgebung soll eine klassische Beschreibung verwendet werden, wodurch der numerische Aufwand stark gesenkt wird. Für geeignete Bedingungen, also hohe Temperaturen im System oder eine Kopplung an viele quantenmechanische Freiheitsgrade, kann von einer klassischen Störung durch die Umgebung ausgegangen werden. Statt also neben dem Spin das Bad quantenmechanisch zu beschreiben, wird eine Modellierung durch eine skalare klassische Störungen vorgenommen. Auch unter der starken Vereinfachung einer klassischen fluktuierenden Störung kann das System im allgemeinen nicht analytisch gelöst werden. Der Rechenaufwand ist allerdings deutlich niedriger, da der betrachtete Hilbertraum des Zwei-Niveau-Systems zweidimensional ist.

Motiviert wird diese Modellierung mit klassischen Fluktuationen durch die entsprechende Näherung für ein System aus Spins wie in den Referenzen [8] und [9]. Hier wird die Dynamik eines Zentralspins, der an Umgebungsspins koppelt, ebenfalls durch klassische Fluktuationen beschrieben. Die dabei gestellten Bedingungen an die Fluktuationen und das System werden auch als Grundlage für diese Arbeit genutzt. Im wesentlichen muss hierbei der Einfluss des Zentralspins auf das Bad vernachlässigbar sein.

Durch eine geeignete Methode bei der Berechnung der Zeitenwicklungsoperatoren kann der Aufwand sogar weiter reduziert werden. Die verwendete Magnus-Entwicklung wird in Referenz [10] umfangreich präsentiert. Mit ihr können die auftretenden Differentialgleichungen systematisch bis zu beliebigen Ordnungen im Kopplungsparameter zwischen Spin und Umgebung berechnet werden. Dann sind die quantenmechanischen Rechnungen, im Fall dieser Arbeit die Mittelung von Operatoren, analytisch durchführbar. Ausschließlich die Wirkung der fluktuierenden Störung muss numerisch behandelt werden, dies beschränkt sich aber auf simple Integration.

Ziel der Arbeit ist die Untersuchung eines durch klassische Fluktuationen gestörten Zwei-Niveau-Systems. Dafür werden Rechnungen gestützt durch die Magnus-Entwicklung und rein numerische Verfahren genutzt. Dabei wird das qualitative Verhalten der untersuchten Größen bei beiden Methoden betrachtet und verglichen, um die Güte der Magnusentwicklung als Approximation auf ihre führende Ordnung beurteilen zu können.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die physikalischen Grundlagen der Arbeit vorgestellt.

Im ersten Abschnitt (2.1) wird das betrachtete Modell dargestellt. Die Bedeutung der Systemparameter und der Zusammenhang mit realen physikalischen Experimenten werden beschrieben.

Im folgenden Abschnitt (2.2) werden die untersuchten Größen definiert und die benötigten Methoden zur Berechnung erklärt.

2.1 Modell

Die physikalische Situation ist ein Spin mit $S = \frac{1}{2}$ in einem externen Feld, der mit seiner Umgebung wechselwirkt. Dies beschreibt zum Beispiel einen Elektronenspin in einem Quantendot, der an die Phononen oder andere bosonische Freiheitsgrade des umgebenden Festkörpers koppelt. Als weiteres Beispiel kann ein Kernspin betrachtet werden, der mit umgebenden Spins und insbesondere durch die Hyperfeinwechselwirkung mit deren Magnetfeldern wechselwirkt. Hierbei werden die Umgebungsspins als klassisch fluktuierendes Feld genähert.

Im Prinzip kann das Modell auch für weitere physikalische Systeme genutzt werden. Allerdings soll im weiteren von einer Hochtemperatur-Näherung ausgegangen werden, weshalb einige physikalische Systeme nicht mehr sinnvoll beschrieben werden können. Insbesondere schließt der Hochtemperatur-Limes solche Systeme aus, die nur durch bestimmte Niederenergie-Näherungen auf ein effektives Zwei-Niveau-System abgebildet werden können.

Der gesamte Hamiltonoperator kann gemäß der obigen Annahme in einen freien und einen gekoppelten Anteil aufgeteilt werden. Der freie Anteil beschreibt die Wirkung eines externen Feldes auf den betrachteten Spin. Der Kopplungsanteil beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem Spin und seiner Umgebung.

2.1.1 Freies System

Ein isolierter Zentralspin in einem externen Feld soll durch einen geeigneten Hamiltonoperator beschrieben werden. Da von einem Spin mit $S = \frac{1}{2}$ ausgegangen wird, können zur Beschreibung die drei Paulimatrizen σ_i mit $i \in \{1,2,3\}$ genutzt werden. Eine mögliche Darstellung ist

$$H_0 = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\varepsilon}{2}\sigma_1 \quad (2.1)$$

Im Hamiltonoperator ist auch ein linearer Term in σ_2 möglich. Allerdings kann durch eine geeignete Rotation um die σ_1 - oder σ_3 -Achse der Hamiltonoperator in die vorgestellte Form gebracht werden. Somit werden die physikalischen Eigenschaften des System durch das transversale σ_1 - und das longitudinale σ_3 -Feld vollständig erfasst. Die reine mathematische Beschreibung kann physikalisch anschaulich interpretiert werden. Der Term $\frac{\Delta}{2}$ beschreibt die Energieaufspaltung der Spinzustände durch den Zeeman-Effekt. Also senkt eine Ausrichtung parallel zum Magnetfeld die Energie des Spins um $\frac{\Delta}{2}$ ab, während eine antiparallele Ausrichtung die Energie um den selben Betrag erhöht. Der Term $\frac{\varepsilon}{2}$ beschreibt Spinflips, also Wechsel der Ausrichtungen mit und gegen dem externen Feld. Durch das Magnetfeld in x -Richtung werden Übergänge zwischen den beiden Zuständen induziert. Diese Wechsel in der Ausrichtung des Spins werden als Flips bezeichnet, da der Spin zwischen Rauf- und Runter-Spin entlang $\mathbf{e}_3$ wechselt. Statt die Dynamik des Zustandes kann auch das Verhalten der Spinoperatoren σ_i unter Einwirkung des externen Feldes betrachtet werden. Dies entspricht einer Beschreibung im Heisenbergbild. Der Hamiltonoperator kann als Skalarprodukt vom Vektor $\boldsymbol{\omega}_0$ und dem Spinvektor $\boldsymbol{\sigma}$ aufgefasst werden. Dieser hat die Form

$$\boldsymbol{\omega}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ 0 \\ -\Delta \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

womit für den Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}_0^T \boldsymbol{\sigma} \quad (2.3)$$

gilt. Der Hamiltonoperator erzeugt eine Rotation der Spinoperatoren um die Achse, die durch den Vektor $\boldsymbol{\omega}_0$ ausgezeichnet wird. Der Betrag ω_0 des Vektors ist hierbei die Rotationsfrequenz, wenn $\hbar = 1$ angenommen wird. Um diese beiden Eigenschaften direkt in der Gestalt des Vektors $\boldsymbol{\omega}_0$ wiederzufinden, wird er gemäß

$$\boldsymbol{\omega}_0 = \omega_0 \begin{pmatrix} \cos(\alpha) \\ 0 \\ -\sin(\alpha) \end{pmatrix} = \omega_0 \begin{pmatrix} c \\ 0 \\ -s \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

parametrisiert. Dabei wird der Winkel α eingeführt, der zwischen der σ_1 -Achse und der Rotationsachse eingeschlossen wird.

In dieser Form kann das Modell allerdings keine realistische Dynamik beschreiben, da der Spin vollständig isoliert ist. Insbesondere zerfallen die Korrelationen der Spinoperatoren nicht, es ist also keine Dekohärenz zu beobachten. Für einen Quantencomputer bedeutet dies, dass ein gespeicherte Zustand beliebig lang gespeichert werden kann. Ein Kernspin präzediert für alle Zeiten um die Rotationsachse ω_0 . Experimente zeigen jedoch, dass durch Dekohärenz, induziert durch Wechselwirkung mit der Umgebung, präparierte Zustände zerfallen. Daher muss für eine sinnvolle Beschreibung dieser Effekt berücksichtigt werden.

2.1.2 Wechselwirkung mit der Umgebung

Eine mögliche Beschreibung ist das Spin-Boson-Modell, welches in Referenz [4] vorgestellt wird. Bei diesem Modell wird der Zentralspin an ein Bad freier Bosonen gekoppelt. Der zugehörige Hamiltonoperator ist

$$H_{\text{SB}} = H_0 + \sum_i \omega_i b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \sigma_3 \sum_i \lambda_i (b_i^\dagger + b_i) = H_0 + H_I, \quad (2.5)$$

wobei $b_i^\dagger$ und b_i die Erzeugungs- und Vernichtungsoperator der Bosonen der Energie ω_i sind. Der entsprechende Kopplungsparameter zwischen Bosonen und Zentralspin ist λ_i .

Die Wirkung der Bosonen auf den Spin werden vollständig durch die entsprechende Spektralfunktion $J(\omega)$ beschrieben. Diese ist durch

$$J(\omega) = \pi \sum_i \lambda_i^2 \delta(\omega - \omega_i) \quad (2.6)$$

definiert. Für weitere Betrachtungen wird die Funktion auf verschiedene Weisen genähert. Üblich sind ein cut-off bei der Frequenz ω_c wie zum Beispiel in Referenz [11]

$$J(\omega) = 2\pi\xi\omega_c^{1-s}\omega^s\theta(\omega_c - \omega) \quad (2.7a)$$

oder eine kontinuierliche Darstellung der Form

$$J(\omega) = 2\pi\xi\omega_c^{1-s}\omega^s e^{-\frac{\omega}{\omega_c}} \quad (2.7b)$$

wie in Referenz [4]. Der Parameter ξ gibt hierbei die Stärke der Dekohärenz an. Die Größe s ermöglicht eine Kategorisierung der Umgebung. Für $s = 1$ liegt der ohmsche Fall vor. Entsprechend werden für $s < 1$ und für $s > 1$ die Bezeichnungen sub- beziehungsweise superohmsch genutzt.

An diesem System kann Dekohärenz untersucht werden. Dies ist numerisch relativ aufwändig, daher soll in dieser Arbeit ein alternativer Ansatz gewählt werden.

Im vollen Spin-Boson-Modell wird die Umgebbung durch ein Bosonenbad beschrieben. Statt die Wechselwirkung mit der Umgebung durch quantenmechanische Operatoren zu beschreiben wie im vollen Spin-Boson-Modell in Gleichung (2.5), kann sie unter

geeigneten Umständen näherungsweise auch mit einer klassischen Fluktuation $\eta(t)$ beschrieben werden. Die Näherung kann zum Beispiel durch eine hohe Systemtemperatur T oder eine Kopplung vom Spin an sehr viele Moden gerechtfertigt werden.

Für hohe Temperaturen werden die Eigenschaften der Umgebung maßgeblich durch thermische Effekte bestimmt, der Spin hat also eine vernachlässigbare back-action auf das Bad.

Für die Beschreibung wird angenommen, dass die klassische Fluktuation η an den Zentralspin über die Spinkomponente σ_1 koppelt. Eine allgemeine Darstellung beinhaltet eine Kopplung an alle Spinkomponenten, mit unterschiedlichen Wechselwirkungsstärken. Daher ist dieser Ansatz in der vorgestellten Form als ein erster theoretischer Zugang zu verstehen.

Mit diesen Annahmen hat der Hamiltonoperator die Form

$$H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\varepsilon}{2}\sigma_1 + \frac{\kappa}{2}\eta(t)\sigma_1 = \frac{\omega_0}{2}(-s\sigma_3 + c\sigma_1) + \frac{\kappa}{2}\eta(t)\sigma_1 = H_0 + H_1(t), \quad (2.8)$$

wobei $\eta(t)$ eine Zufallsvariable ist, die sehr vieler Einzeleffekte zusammenfasst. Gemäß des zentralen Grenzwertsatzes kann $\eta(t)$ daher als gaußverteilt angenommen werden. Die zugehörige Verteilung ist also durch die ersten beiden Momente charakterisiert. Dabei kann von einem verschwindenden Mittelwert ausgegangen werden, denn ein endlicher Mittelwert kann als statische Veränderung des äußeren Feldes interpretiert werden. Mit dem Mittelwert $\mu := \overline{\eta(t)}$ bedeutet das

$$H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\varepsilon}{2}\sigma_1 + \frac{\kappa}{2}\eta(t)\sigma_1 = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\varepsilon + \kappa\mu}{2}\sigma_1 + \frac{\kappa}{2}(\eta(t) - \mu)\sigma_1. \quad (2.9a)$$

Die neue Fluktuation $\tilde{\eta}(t) := \eta(t) - \mu$ besitzt somit einen verschwindenden Mittelwert. Mit der renormierte Tunnelrate $\tilde{\varepsilon} := \varepsilon + \kappa\mu$ nimmt der Hamiltonoperator die Form

$$H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\tilde{\varepsilon}}{2}\sigma_1 + \frac{\kappa}{2}\tilde{\eta}(t)\sigma_1 \quad (2.9b)$$

an. Im Folgenden werden der Einfachheit halber die ursprünglichen Bezeichnungen $\eta(t)$ und ε verwendet, da von einem geeignet parametrisierten Hamiltonoperator ausgegangen wird.

Daneben ist das zweite Moment oder die Varianz wichtig, die aus dem Mittelwert von Produkten der Fluktuationen berechnet werden kann. Insgesamt gilt für die Momente

$$\overline{\eta(t)} = 0 \quad (2.10a)$$

$$\overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} =: g(|t_1 - t_2|), \quad (2.10b)$$

wobei $g(t)$ die Autokorrelationsfunktion der Fluktuationen ist. Da die Stärke der Kopplung durch den Parameter κ beschrieben wird, kann für die Autokorrelation des Rauschens

$$g(0) = 1 \quad (2.11)$$

festgelegt werden, andernfalls können die Fluktuationen $\eta(t)$ entsprechend umskaliert werden. Darüber hinaus können weitere Annahmen für die Funktion gemacht werden. Für diese Arbeit soll ein exponentieller Zerfall der Funktion $g(t)$ wie in Referenz [12] verwendet werden. Die Autokorrelationsfunktion hat also die Form

$$g(t) = e^{-\Omega|t|}, \quad (2.12)$$

wobei $\Omega > 0$ die Zerfallskonstante von $g(t)$ ist.

Der Parameter κ beschreibt in diesem Modell die Kopplung zwischen Spin und dem Bad. Im Prinzip kann die Kopplung als zufällige Variation der Tunnelungrate ε aufgefasst werden. Dies führt zu einer veränderten Rotationsachse und -geschwindigkeit. Für eine Berechnung von physikalischen Erwartungswerten muss dann über alle möglichen Fluktuationen gemittelt werden.

Der offensichtliche Vorteil dieses Modells ist, dass nur der Spin quantenmechanisch beschrieben wird. Der Rechenaufwand im Vergleich zur notwendigen Numerik im vollen Spin-Boson-Modell ist daher stark gesenkt.

2.2 Spinkorrelationen

Für eine Betrachtung der Dekohärenz eines Systems sind Korrelationen eine relevanten Untersuchungsgrößen. Sie geben Aufschluss über die Vorhersagbarkeit des Verhaltens einer physikalischen Größe. Insbesondere bleiben die Korrelationen in einem kohärenten System für alle Zeiten endlich. Für eine oszillierende Korrelation bedeutet dies, dass die Amplitude mit der Zeit nicht abnimmt. Also ist ein Zerfall der Spinkorrelationen mit Dekohärenz verknüpft.

Die Korrelation beschreibt gerade den Mittelwert der Projektion eines zeitabhängigen Spinoperators auf einer der drei Spinrichtungen. Entsprechend können neun im Allgemeinen unterschiedliche Korrelationen durch die Gleichung

$$C_{ij}(t) := \overline{\langle \sigma_i(t) \sigma_j \rangle} \quad (2.13)$$

definiert werden. Diese werden in der Korrelationsmatrix $\mathbf{C}(t)$ zusammengefasst, die durch

$$\mathbf{C} := \begin{pmatrix} \overline{\langle \sigma_1(t) \sigma_1 \rangle} & \overline{\langle \sigma_1(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_1(t) \sigma_3 \rangle} \\ \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_3 \rangle} \\ \overline{\langle \sigma_3(t) \sigma_1 \rangle} & \overline{\langle \sigma_3(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_3(t) \sigma_3 \rangle} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

definiert wird.

Zur Bestimmung der Korrelationen müssen offensichtlich die zeitabhängigen Spinoperatoren bekannt sein, welche mittels des Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$ berechnet werden können. Zusätzlich muss der gemittelte Erwartungswert $\overline{\langle \sigma_i(t) \sigma_j \rangle}$ bestimmt werden. Dabei treten zwei Mittelungen auf, einmal bezüglich der quantenmechanischen Freiheitsgrade und zum zweiten über die definierten Fluktuationen $\eta(t)$.

Die nötigen Schritte werden in den nächsten Abschnitten beschrieben.

2.2.1 Zeitentwicklung

Die untersuchten Korrelationen sind von der Dynamik der Spinoperatoren abhängig. Zur Beschreibung dieser Dynamik wird der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ verwendet. Die Form dieses Operators soll kurz motiviert werden.

Der Zustand des System im Schrödingerbild sei $|\Psi_S(t)\rangle$. Dieser Zustand erfüllt die Schrödingergleichung

$$i \partial_t |\Psi_S(t)\rangle = H(t) |\Psi_S(t)\rangle \quad (2.15)$$

Andererseits lässt sich der Zustand durch einen geeigneten Operator $U(t, t_0)$ in der Form

$$|\Psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_S(t_0)\rangle \quad (2.16)$$

schreiben. Mit Gleichung (2.15) folgt damit also

$$\partial_t U(t, t_0) = -i H(t) U(t, t_0) \quad \text{mit } U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad (2.17a)$$

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) U(t_1, t_0) \quad (2.17b)$$

Der so berechnete Operator $U(t, t_0)$ ist der Zeitentwicklungsoperator des Systems. Dieser erfüllt die drei Eigenschaften

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \quad \text{Kontinuität} \quad (2.18a)$$

$$U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbb{1} \quad \text{Unitarität} \quad (2.18b)$$

$$U(t, t_0) = U(t, t_1) U(t_1, t_0) \quad \text{Propagator} \quad (2.18c)$$

Die Kontinuität und die Propagatoreigenschaft folgen direkt aus Gleichung (2.16). Denn die Gleichung kann geeignet umgeformt werden, so dass

$$|\Psi_S(t)\rangle = U(t, t_1) |\Psi_S(t_1)\rangle = U(t, t_1) U(t_1, t_0) |\Psi_S(t_0)\rangle \quad (2.19a)$$

$$= U(t, t_0) |\Psi_S(t_0)\rangle, \quad (2.19b)$$

gilt.

Die Unitarität kann durch Ableiten leicht erkannt werden. Denn dann gilt

$$\partial_t \left\{ U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) \right\} = U^\dagger(t, t_0) \left(i H^\dagger(t) - i H(t) \right) U(t, t_0) = 0. \quad (2.20)$$

Dies ist also eine direkte Folge aus der Hermitizität vom Hamiltonoperator $H(t)$, also der Beziehung $H^\dagger(t) = H(t)$.

Die Integraldarstellung kann verwendet werden, um den Operator $U(t, t_0)$ iterativ zu bestimmen. Auf der rechten Seite der Gleichung wird also die Bestimmungsgleichung von $U(t, t_0)$ eingesetzt. Durch wiederholte Anwendung erhält man eine Reihe der Form

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + i^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \dots \quad (2.21)$$

Diese Reihe heit Dyson-Reihe und stellt eine Mglichkeit zur Berechnung der Zeitentwicklungsoperators dar. Sie kann kompakt geschrieben werden, wenn die iterative definierte Abkrzung

$$U^{(n)}(t, t_0) = -i \int_{t_0}^t dt_n H(t_n) U^{(n-1)}(t_n, t_0) \quad \text{mit } U^{(0)}(t, t_0) = 1 \quad (2.22)$$

verwendet wird. Damit folgt dann

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0) \quad (2.23)$$

Um eine in der Literatur typische Notation zu erhalten, wird der Zeitordnungsoperator $\mathcal{T}$ eingefhrt. Dieser ist fr zwei formal zeitabhngige Operatoren durch

$$\mathcal{T} \{A(t_1)B(t_2)\} \equiv \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & \text{fr } t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1), & \text{fr } t_1 < t_2 \end{cases} \quad (2.24)$$

definiert. Fr mehrere Operatoren kann die Definition entsprechend erweitert werden. Der Operator $\mathcal{T}$ sortiert die Operatoren also absteigend nach ihrem Zeitargument. Im Folgenden wird der Operator $\mathcal{T}$ genutzt um den Hamiltonoperator $H(t)$ zu verschiedenen Zeiten zu sortieren. Er wird daher nicht bentigt, wenn $H(t)$ ohnehin zu beliebigen Zeiten mit sich selbst kommutiert. Dies ist fr zeitunabhngige Hamiltonoperatoren grundstzlich gegeben.

Fr den zweiten Integralterm in Gleichung (2.21) kann die Zeitordnung ausgenutzt werden, um eine Beziehung zwischen $U^{(1)}(t)$ und $U^{(2)}(t)$ herzustellen. Hierfr wird als erstes die Umformung

$$U^{(2)}(t, t_0) = \frac{i^2}{2} \mathcal{T} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 H(t_1) H(t_2) \right\} \quad (2.25a)$$

durchgefhrt. Durch Austausch der Koordinaten im zweiten Integral folgt

$$U^{(2)}(t, t_0) = \frac{i^2}{2} \mathcal{T} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 H(t_2) H(t_1) \right\}. \quad (2.25b)$$

Wegen der Zeitordnung knnen die Operatoren beliebig vertauscht werden, weshalb

$$U^{(2)}(t, t_0) = \frac{i^2}{2} \mathcal{T} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 H(t_1) H(t_2) \right\} \quad (2.25c)$$

gilt. Die Integrale knnen nun zusammengefasst werden, wobei die Grenzen der Integrale beachtet werden mssen. Damit folgt

$$U^{(2)}(t, t_0) = \frac{i^2}{2} \mathcal{T} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 H(t_1) H(t_2) \right\}. \quad (2.25d)$$

Als letztes wird der Zusammenhang zur Größe $U^{(1)}(t, t_0)$ hergestellt. Dabei gilt

$$U^{(2)}(t, t_0) = \frac{1}{2} \mathcal{T} \left\{ \left(-i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \right)^2 \right\} = \frac{1}{2} \mathcal{T} \left\{ \left(U^{(1)}(t, t_0) \right)^2 \right\}. \quad (2.25e)$$

Die Rechnungen für höhere Ordnungen von $U^{(n)}(t)$ verläuft analog. Dabei werden $n!$ Summanden im ersten Schritt benötigt statt zwei wie im obigen Beispiel. Dies ergibt sich aus der Anzahl der möglichen Permutationen bei den Koordinatentransformationen und dem Ziel, alle Integrationsgrenzen zu (t_0, t) zu transformieren. Durch diesen Faktor muss geteilt werden, um den Integralwert unverändert zulassen. Für den Operator $U(t, t_0)$ kann mit diesen Umformungen die Beziehung

$$U(t, t_0) = \mathcal{T} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(U^{(1)}(t, t_0) \right)^n \right\} \equiv \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \right) \right\} \quad (2.26)$$

hergeleitet werden. Diese Darstellung ist im wesentlichen nur eine verkürzte Schreibweise für die Dyson-Reihe in Gleichung (2.21). Sie kann im Allgemeinen nicht für eine explizite Berechnung genutzt werden, wird aber in der Literatur wie zum Beispiel in den Referenzen [13] und [14] sehr oft verwendet.

Im Folgenden wird die Startzeit $t_0 = 0$ gewählt. Dann kann die Abkürzung $U(t) = U(t, t_0 = 0)$ verwendet werden.

2.2.2 Zeitabhängige Operatoren

Die Dynamik eines quantenmechanischen System kann in den Zuständen oder in den Operatoren enthalten sein. Welche Größen zeitabhängig sind, hängt vom gewählten Bild ab. Oft wird das verwendete Bild durch einen Index gekennzeichnet.

Im Schrödingerbild sind die Zustände zeitabhängig, die meisten Operatoren sind zeitunabhängig. Die Schrödingergleichung (2.15) beschreibt die Dynamik der Zustände. Die Spinoperatoren selbst sind konstant. Der Index des Schrödingerbildes ist das S.

Im Heisenbergbild sind die Operatoren zeitabhängig, die Zustände hingegen konstant. Daher besteht zwischen den Zuständen der beiden Bilder die Beziehung

$$|\Psi_H\rangle = U^\dagger(t) |\Psi_S(t)\rangle \Leftrightarrow |\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle. \quad (2.27)$$

Dabei wird der Index H für das Heisenbergbild verwendet.

Die Erwartungswerte müssen unabhängig vom gewählten Bild sein. Dies kann ausgenutzt werden, um die Operatoren im Heisenbergbild zu bestimmen. Es gilt

$$\langle \Psi_S(t) | A_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_S(0) | U^\dagger(t) A_S U(t) | \Psi_S(0) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle. \quad (2.28)$$

Aus dieser Gleichung folgt, dass für Operatoren im Heisenbergbild

$$A_H(t) = U^\dagger(t) A_S U(t) \quad (2.29)$$

gilt. Damit können also die nötigen Spinoperatoren $\sigma_{i,H}(t)$ für die Korrelationen bestimmt werden. Explizit gilt hierbei

$$\sigma_{i,H}(t) = U^\dagger(t) \sigma_i U(t). \quad (2.30)$$

Im Folgenden wird für die Paulimatrizen im Heisenbergbild die verkürzte Schreibweise $\sigma_i(t)$ verwendet.

2.2.3 Wechselwirkungsbild

Für die hier vorgestellte physikalische Situation ist eine Aufteilung in einen freien Anteil H_0 und einen Wechselwirkungsanteil $H_1(t)$ des Hamiltonoperators sinnvoll. Insbesondere kann ausgenutzt werden, dass H_0 zeitunabhängig ist. Damit kann der entsprechende Zeitentwicklungsoperator analytisch bestimmt werden. Die Differentialgleichung (2.17a) wird durch den Ansatz

$$U_0(t) = \exp(-iH_0 t) = \exp\left(-i\frac{\omega_0}{2}(-s\sigma_3 + c\sigma_1)t\right) \quad (2.31)$$

gelöst. Dieser Operator $U_0(t)$ kann genutzt, um das System ins Dirac- oder Wechselwirkungsbild zu überführen. In diesem Bild sind sowohl die Zustände als auch die Operatoren zeitabhängig. Der Index für das Diracbild ist das D.

Zwischen den Zuständen $|\Psi_S(t)\rangle$ im Schrödingerbild und $|\Psi_D(t)\rangle$ im Diracbild gilt die Beziehung

$$|\Psi_D(t)\rangle = U_0^\dagger(t) |\Psi_S(t)\rangle. \quad (2.32)$$

Entsprechend kann auch ein Operator A_S transformiert werden, wenn

$$A_D = U_0^\dagger(t) A_S U_0(t) \quad (2.33)$$

ausgenutzt wird.

Ausgehend von diesen Relationen kann der Zeitentwicklungsoperator $U_D(t)$ im Diracbild definiert werden. Durch Ableiten erhält man

$$\partial_t |\Psi_D(t)\rangle = \partial_t U_0^\dagger(t) |\Psi_S(t)\rangle = -iU_0^\dagger(t)(H_0 - H(t)) |\Psi_S(t)\rangle. \quad (2.34a)$$

Durch Ausnutzung der Unitarität $U_0(t)U_0^\dagger(t) = \mathbb{1}$ kann

$$\partial_t |\Psi_D(t)\rangle = -iU_0^\dagger(t)H_1(t)U_0(t)U_0^\dagger(t) |\Psi_S(t)\rangle = -iH_{1,D}(t) |\Psi_D(t)\rangle \quad (2.34b)$$

berechnet werden. Hierbei ist $H_{1,D}(t)$ der Wechselwirkungsoperator $H_1(t)$ im Diracbild, berechnet sich also nach der Definition in Gleichung (2.33). Die Dynamik im Diracbild wird folglich durch die Gleichung

$$\partial_t |\Psi_D(t)\rangle = -iH_{1,D}(t) |\Psi_D(t)\rangle \quad (2.35)$$

beschrieben. Analog zur Gleichung (2.16) im Schrödingerbild ist auch die Darstellung

$$|\Psi_D(t)\rangle = U_D(t) |\Psi_D(0)\rangle \quad (2.36)$$

möglich. Durch Vergleich kann die Differentialgleichung

$$\partial_t U_D(t) = -iH_{1,D}(t)U_D(t) \quad \text{mit } U_D(0) = \mathbb{1} \quad (2.37)$$

für den Zeitenwicklungsoperator $U_D(t)$ gefunden werden. Eine Lösung kann wie für Gleichung (2.17a) bestimmt werden.

Mit den bekannten Operatoren $U_0(t)$ und $U_D(t)$ ist die Berechnung der Dynamik von Operatoren möglich. Durch Ausnutzung von Gleichung (2.32) und (2.36) ergibt sich der Zusammenhang

$$U(t) = U_0(t)U_D(t) \quad (2.38)$$

zwischen den Zeitentwicklungsoperatoren. Also gilt für die zeitabhängigen Spinoperatoren explizit

$$\sigma_i(t) = U_D^\dagger(t)U_0^\dagger(t)\sigma_i U_0(t)U_D(t). \quad (2.39)$$

Ein Vorteil dieser Darstellung ist, dass die analytisch berechenbaren Anteile in $U_0(t)$ enthalten sind. Daneben wird ausgenutzt, dass der Wechselwirkungsanteil $H_{1,D}(t)$ von einem kleinem Parameter abhängt, was eine Näherungslösung für $U_D(t)$ ermöglicht.

2.2.4 Mittelung

Für die Berechnung der Korrelationen muss $\mathcal{C}_{ij}(t)$ bezüglich der quantenmechanischen Freiheitsgrade und bezüglich der Fluktuationen gemittelt werden.

Die Erwartungswerte bezüglich der physikalischen Freiheitgerade werden durch Spurbildung berechnet. Dabei wird der zu mittelnde Operator mit dem Dichteoperator ρ gewichtet. Der statistische Dichteoperator hat die Form

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (2.40)$$

wobei Z die Zustandssumme des Systems und β die Inverse der thermischen Energie $k_B T$ sind. Die Zustandssumme Z berechnet sich als Spur von $\exp(-\beta H)$, demnach gilt

$$Z = \langle e^{-\beta H} \rangle. \quad (2.41)$$

Der Mittelwert des Operator A hat die Form

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \left\{ \frac{1}{Z} \exp(-\beta H) A \right\}. \quad (2.42)$$

Im Hochtemperatur-Limes ist $\beta = 0$. Für die Zustandssumme folgt damit $Z = 2$, da der betrachtete Hilbertraum zweidimensional ist und Z für $\beta = 0$ die Spur der

Einheitsmatrix ist. Für den Dichteoperator folgt $\rho = \frac{1}{2}$. Damit ist der Erwartungswert des Operators A

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \{A\}. \quad (2.43)$$

Insbesondere verschwinden die Erwartungswerte aller Spinoperatoren, da die Paulimatrizen spurfrei sind. Durch die unendlich hohe Temperatur ist keine Spinrichtung ausgezeichnet, daher kann es keinen endlichen Mittelwert für eine Richtung geben.

Die Wirkung der Fluktuation muss ebenfalls passend berücksichtigt werden. Mathematisch lässt sich dies mit Integralen über die Fluktuationen beschreiben. Die Details dazu werden in Kapitel 3.2 beschrieben. Diese Integration über die Fluktuationen werden mit einem Strich über den Ausdrücken gekennzeichnet.

2.2.5 Definition von parallen und normalen Spinvektoren

Bisher werden die drei Spinoperatoren σ_1 , σ_2 und σ_3 und deren Korrelationen betrachtet. Durch das externe Feld kann die Betrachtung spezieller Spinoperatoren motiviert werden, da dieses die Spinoperatoren in parallele und normale Anteile unterteilt. Der externe Hamiltonoperator H_0 kann als Skalarprodukt der Form

$$H_0 = \boldsymbol{\omega}_0^T \boldsymbol{\sigma} \quad (2.44)$$

geschrieben werden. Die Ausrichtung zum Feld wird dann entsprechend der Richtung des Vektors $\boldsymbol{\omega}_0$ definiert. Daraus folgt, dass es einen Parallelsin und zwei Normalspins gibt. Der Operator σ_2 steht offensichtlich senkrecht zum Feld. Daneben können der Parallelsin σ_p und der Normalsin σ_n definiert werden. Für diese gilt

$$\sigma_p := c\sigma_1 - s\sigma_3 \quad (2.45a)$$

$$\sigma_n := s\sigma_1 + c\sigma_3, \quad (2.45b)$$

wobei die bereits definierten Abkürzungen $c = \cos(\alpha)$ und $s = \sin(\alpha)$ verwendet werden. Entsprechend können Korrelationsfunktionen zwischen σ_p , σ_n und σ_2 bestimmt werden. Die entsprechenden Korrelationen werden in der Matrix

$$\mathbf{P} := \begin{pmatrix} \overline{\langle \sigma_p(t) \sigma_p \rangle} & \overline{\langle \sigma_p(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_p(t) \sigma_n \rangle} \\ \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_p \rangle} & \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_2(t) \sigma_n \rangle} \\ \overline{\langle \sigma_n(t) \sigma_p \rangle} & \overline{\langle \sigma_n(t) \sigma_2 \rangle} & \overline{\langle \sigma_n(t) \sigma_n \rangle} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

zusammengefasst. Diese Korrelationen werden in der Arbeit unteruscht und im folgenden als effektive Korrelationen bezeichnet. Die Matrix $\mathbf{P}$ wird durch eine Drehung um die y -Achse um den Winkel α aus der Korrelationsmatrix $\mathbf{C}$ bestimmt, wobei die entsprechende Rotationsmatrix

$$\mathbf{R}_\alpha = \begin{pmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & c \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

verwendet wird. Explizit gilt also für die Matrix $\boldsymbol{P}$ die Beziehung

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{R}_\alpha \boldsymbol{C} \boldsymbol{R}_\alpha^{\text{T}}. \quad (2.48)$$

Für den Fall $\alpha = 0$ gilt $\boldsymbol{R} = \mathbf{1}$, also ist in diesem Fall $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{C}$.

Kapitel 3

Mathematische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die mathematischen Grundlagen vorgestellt, die in der Arbeit verwendet werden.

Im ersten Abschnitt werden Eigenschaften der Spinalgebra und die daraus resultierende Formeln für die Spinoperatoren vorgestellt. Danach wird beschrieben, wie die Fluktuationen mathematisch behandelt werden. Der dritte Abschnitt beschreibt die Magnus-Entwicklung, eine Möglichkeit zur Berechnung der Zeitentwicklungsoperatoren. Der letzte Abschnitt stellt die Frobeniusnorm vor, die zur Analyse der Korrelationsmatrizen genutzt wird.

3.1 Spinalgebra

Die mathematische Beschreibung der Spinoperatoren geschieht durch die Paulimatrizen. Diese werden gemäß Referenz [13] durch

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

definiert. Die Paulimatrizen sind hermitesch und unitär. Ihre Spuren verschwinden. Zusammen mit der Einheitsmatrix $\mathbb{1}$ spannen diese Matrizen den vierdimensionalen Vektorraum der $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ -Matrizen auf. Daher werden nur die drei Operatoren benötigt um das vorgestellte quantenmechanische System in Kapitel 2.1 zu modellieren. Mit kurzen Rechnungen kann die wesentliche Beziehung

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + \mathrm{i} \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.2)$$

bestätigt werden. Diese Gleichung beschreibt wesentliche Eigenschaften der Paulimatrizen. Das Quadrat jeder Paulimatrix ist die Einheitsmatrix und das Produkt zweier verschiedener Paulimatrizen ist, bis auf einen Vorfaktor, die Dritte. Diese Eigenschaften sind für folgende Formeln wesentlich.

3.1.1 Abgeleitete Formeln

Im Folgenden treten häufiger einige Relationen mit den Spinoperatoren auf. Die Herleitungen sind im Appendix B dargestellt. Die hier verwendeten Vektoren $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ und $\mathbf{c}$ sind Elemente des $\mathbb{C}^3$ und hängen im Allgemeinen von der Zeit ab. Die Größen α und β sind zeitabhängige komplexe Skalare. Auf eine explizite Angabe der Zeitabhängigkeit durch ein entsprechendes Argument wird der Übersichtlichkeit halber verzichtet.

Für die Magnus-Entwicklung des betrachteten System sind Kommutatoren der Form

$$[\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}] = 2i (\mathbf{a} \times \mathbf{b})^T \boldsymbol{\sigma} =: \mathbf{c}^T \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.3)$$

Für den definierten Vektor $\mathbf{c}$ sollen der Real- und Imaginärteil untersucht werden. Für diese können die Beziehungen

$$\operatorname{Re} [\mathbf{c}] = -2 \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} \operatorname{Im} [a_i b_j] \mathbf{e}_k \quad (3.4a)$$

$$\operatorname{Im} [\mathbf{c}] = 2 \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} \operatorname{Re} [a_i b_j] \mathbf{e}_k \quad (3.4b)$$

gefunden werden. Sind die Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ also rein reelle oder rein imaginäre Vektoren, so ist $\mathbf{c}$ ein rein imaginärer Vektor. Der Vektor $\mathbf{c}$ ist rein reell, wenn einer der Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ rein imaginär und der andere rein reell ist. Diese Tatsache wird in Gleichung (3.31) wichtig.

Für die numerische Berechnung der zeitabhängigen Spinoperatoren wird die Relation

$$\begin{aligned} e^{-i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}} e^{-i\beta \mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \sin(\alpha a) \sin(\beta b) \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{ab} - i \sin(\alpha a) \cos(\beta b) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \\ &\quad - i \sin(\beta b) \cos(\alpha a) \frac{\mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}}{b} - i \sin(\alpha a) \sin(\beta b) \frac{(\mathbf{a} \times \mathbf{b})^T \boldsymbol{\sigma}}{ab} \end{aligned} \quad (3.5)$$

benötigt.

Als letztes soll die grundlegende Formel zur Berechnung von zeitabhängigen Spinoperatoren vorgestellt werden. Da sich die Entwicklungsoperatoren $U(t)$ als Exponentialfunktionen schreiben lassen, gilt für die Spinoperatoren die Beziehung

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \exp(i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\sigma} \exp(-i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.6a)$$

$$= \cos(2\alpha a) \boldsymbol{\sigma} + [1 - \cos(2\alpha a)] \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a^2} \mathbf{a} - \sin(2\alpha a) \frac{\mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma}}{a}, \quad (3.6b)$$

wobei der Vektor $\mathbf{a}$ und das Skalar α zeitabhängig sein können und geeignet gewählt werden müssen. Für Gleichung (3.6b) kann eine äquivalente lineare Gleichung angegeben werden, wofür die Abkürzungen

$$c_1 := \cos(2\alpha a) \quad (3.7a)$$

$$c_2 := 1 - \cos(2\alpha a) \quad (3.7b)$$

$$c_3 := \sin(2\alpha a) \quad (3.7c)$$

definiert werden. Mit diesen kann Gleichung (3.6b) als

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \begin{pmatrix} c_1 + c_2 \frac{a_1^2}{a^2} & c_2 \frac{a_1 a_2}{a^2} + c_3 \frac{a_3}{a} & c_2 \frac{a_1 a_3}{a^2} - c_3 \frac{a_2}{a} \\ c_2 \frac{a_1 a_2}{a^2} - c_3 \frac{a_3}{a} & c_1 + c_2 \frac{a_2^2}{a^2} & c_2 \frac{a_2 a_3}{a^2} + c_3 \frac{a_1}{a} \\ c_2 \frac{a_1 a_3}{a^2} + c_3 \frac{a_2}{a} & c_2 \frac{a_2 a_3}{a^2} - c_3 \frac{a_1}{a} & c_1 + c_2 \frac{a_3^2}{a^2} \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} =: \boldsymbol{\Sigma}(t) \boldsymbol{\sigma} \quad (3.8)$$

geschrieben werden. Anschaulich kann die Matrix $\boldsymbol{\Sigma}$ als eine Drehung um die durch $\mathbf{a}$ definierte Achse interpretiert werden. In den folgenden Rechnungen wird diese Matrix für verschiedene Vektoren $\mathbf{a}$ und Skalare α berechnet. Wenn als Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ oder $U_D(t)$ verwendet werden, wird dies durch die Indizes 0 bzw D an der Matrix $\boldsymbol{\Sigma}$ gekennzeichnet.

3.2 Fluktuationen und Zufallszahlen

Um die Vorstellung einer klassischen Fluktuation mathematisch abzubilden, bedarf es einiger Hilfsmittel. Im Wesentlichen beruhen die Berechnungen mit solchen Zufallszahlen auf der Tatsache, dass sie als gaußverteilt angenommen werden können. Dies ist eine Folge des zentralen Grenzwertsatzes. Vereinfacht ist die Aussage des Satzes, dass Summen aus vielen beliebig verteilten Zufallszahlen annähernd normalverteilt sind.

Die Fluktuationen $\eta(t)$ sollen nach Kapitel 2.1 ein verschwindendes erstes Moment und ein endliches zweites Moment besitzen. Damit ist prinzipiell die entsprechende Verteilungsfunktion bestimmt. Problematisch bei den betrachteten Fluktuationen $\eta(t)$ ist jedoch die Zeitabhängigkeit. Denn in den meisten Modellen wird die Zeit als kontinuierliche Größe angenommen.

Eine mögliche Darstellung kann für diskrete Zeiten leicht angegeben werden. Die Zufallszahl η wird dann durch einen N dimensionalen Vektor beschrieben, wobei der i -te Eintrag der Zufallszahl zum Zeitpunkt t_{i-1} mit $i \leq N$ entspricht. Die Zeitpunkte sind mit der Gleichung

$$t_i = t_{i-1} + \delta t \quad (3.9)$$

verbunden und unterscheiden sich um den Zeitschritt δt .

Zur Angabe der Verteilungsfunktion wird dann nur noch die Kovarianzmatrix $\mathbf{M}_\eta$ benötigt. Die Elemente berechnen sich nach der Vorschrift

$$M_{\eta,ij} = \overline{\eta_i \eta_j} = g(|i - j| \delta t). \quad (3.10)$$

Dies ist eine diskrete Darstellung der Fluktuationen $\eta(t)$ und der Autokorrelationsfunktion $g(t)$ in Gleichung (2.10b). Für den Limes $\delta t \rightarrow 0$ enthält sie alle möglichen Informationen über die Fluktuationen $\eta(t)$.

Unter dieser Voraussetzung ist die Verteilungsfunktion durch

$$P(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi |\mathbf{M}_\eta|}} \exp \left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{M}_\eta^{-1} \boldsymbol{\eta} \right) \quad (3.11)$$

gegeben, wobei $|\mathbf{M}_\eta|$ die Determinante der Matrix $\mathbf{M}$ ist (vergleiche Gleichung (2.1) aus Referenz [15]).

Soll eine Funktionen $f(\eta)$ gemittelt werden, wird hierfür die Vorschrift

$$\bar{f} := \int_{\mathbb{R}^N} d\eta f(\eta) P(\eta) \quad (3.12)$$

verwendet.

Diese Beschreibung kann für kontinuierliche Zeiten im Limes $\delta t \rightarrow 0$ erweitert werden, wodurch der Vektor η dann als unendlichdimensional interpretiert werden kann. Dies führt auf eine Berechnung über Pfadintegrale. Der Formalismus wird durch die veränderte Notation

$$f(\eta) \rightarrow f[\eta(t)] \quad (3.13)$$

gekennzeichnet und soll andeuten, dass $\eta(t)$ selbst von einer kontinuierlichen Größe abhängt und damit eine Funktion ist. Die entsprechende Mittelung wird als

$$\bar{f} = \int f[\eta(t)] P[\eta(t)] D\eta \quad (3.14)$$

geschrieben. In dieser Arbeit soll allerdings ein anderer Ansatz gewählt werden. Statt der unendlichdimensionalen Vektors η soll eine endlichdimensionale, effektive Fluktuation $\mathbf{v}$ im nächsten Abschnitt eingeführt werden.

3.2.1 Effektive Fluktuationen

Unter geeigneten Umständen können effektive Fluktuationen verwendet werden. Der Vorteil besteht darin, dass die effektiven Fluktuationen zum gleichen Zeitpunkt t definiert sind. Dadurch wird eine Beschreibung durch unendlichdimensionale Vektoren vermieden. Allgemein können effektive Fluktuationen mit der Formel

$$\mathbf{v}(t) := \int_0^t dt_1 \mathbf{a}(t_1) \eta(t_1) \quad (3.15)$$

bestimmt werden, wobei der reelle Vektor $\mathbf{a}(t)$ durch ein spezielles Problem definiert. Insbesondere kann sich die Dimension des Vektors je nach Situation unterscheiden. Im Folgenden wird auf die explizite Angabe der Zeitabhängigkeit von $\mathbf{v}(t)$ für übersichtlichere Formeln verzichtet.

Die Vektoren $\mathbf{v}(t)$ sind nach Definition gewichtete Summen der gaußverteilten Zufallsvariable $\eta(t)$, womit $\mathbf{v}$ selbst gaußverteilt ist. Der Vektor ist also durch die ersten beiden Momente vollständig charakterisiert. Mit den geforderten Eigenschaften der Fluktuation $\eta(t)$ in den Gleichungen (2.10a) und (2.10b) können die Momente von $\mathbf{v}$ bestimmt werden. Der Mittelwert verschwindet, denn es gilt

$$\bar{v}_i = \int_0^t dt_1 \mathbf{a}(t_1) \underbrace{\overline{\eta(t_1)}}_{=0} = 0 \quad (3.16)$$

für jede Komponente i . Die entsprechenden zweiten Momente werden in der Korrelationsmatrix $\mathbf{M}$ zusammen gefasst. Die Elemente M_{ij} werden mit

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \overline{v_i v_j} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \overline{\eta(t_1) \eta(t_2)} a_i(t_1) a_j(t_2) \\ &= \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) a_i(t_1) a_j(t_2) \end{aligned} \quad (3.17)$$

bestimmt. Für die explizite Berechnung der Komponenten muss die Korrelationsfunktion $g(t)$ der ursprünglichen Zufallszahlen bekannt sein.

Aus der Form der Matrixelemente folgt, dass die Korrelationsmatrix symmetrisch und reell ist. Denn unter Vertauschung der Indizes i und j ändert sich die Bestimmungsgleichung (3.17) nicht, es gilt also $M_{ij} = M_{ji}$. Mit kurzer Rechnung in Anlehnung an die Darstellung in Refrenz [15] kann gezeigt werden, dass die Matrix positiv semidefinit ist, also die Relation

$$\mathbf{b}^T \mathbf{M} \mathbf{b} \geq 0 \quad \text{für alle Vektoren } \mathbf{b} \quad (3.18)$$

erfüllt. Dafür wird das Quadrat der Größe $\mathbf{b}^T \mathbf{v}$ für einen beliebigen reellen Vektor $\mathbf{b}$ gemittelt. Dann gilt nämlich

$$\overline{(\mathbf{b}^T \mathbf{v})^2} = \sum_{i,j} b_i b_j \overline{v_i v_j} = \sum_{i,j} b_i b_j M_{ij} = \mathbf{b}^T \mathbf{M} \mathbf{b} \geq 0. \quad (3.19)$$

Das Quadrat auf der linken Seite ist per Definition nichtnegativ, womit die letzte Ungleichung gewährleistet wird.

Mit der Matrix $\mathbf{M}$ kann die Verteilungsfunktion $P(\mathbf{v})$ definiert werden. Für diese gilt

$$P(\mathbf{v}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi|\mathbf{M}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{v}\right). \quad (3.20)$$

Die Größe ist durch den Vektor $\mathbf{v}$ und die Matrix $\mathbf{M}$ immer noch zeitabhängig, für eine übersichtlichere Formeln wird aber auf eine explizite Angabe der Zeitabhängigkeit verzichtet. Soll eine Funktion $f(\mathbf{v})$ bezüglich der der Fluktuation $\mathbf{v}$ gemittelt werden, kann hierfür das endlichdimensionale Integral

$$\overline{f(\mathbf{v})} := \int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{v} f(\mathbf{v}) P(\mathbf{v}) \quad (3.21)$$

verwendet werden.

3.3 Magnus-Entwicklung

Um die zeitabhängigen Spinoperatoren zu bestimmen, muss der entsprechende Zeitentwicklungsoperator bekannt sein. Die Gleichung (2.37) beschreibt eine nichtlineare

Differentialgleichung für den Operator $U_D(t)$. Für den Fall, dass der Wechselwirkungsanteil $H_{1,D}(t)$ des Hamiltonoperator zu verschiedenen Zeiten mit sich kommutiert, kann direkt eine Lösung angegeben werden. In Kapitel 4 werden diese Fälle besprochen. Im Allgemeinen vertauscht der Operator $H_{1,D}(t)$ allerdings nicht. Der Grund dafür sind die endlichen Kommutatoren und nicht die Zeitabhängigkeit.

Zeitabhängige Operatoren können in zwei Kategorien eingeteilt werden. Der erste Typus besitzt die Form

$$A(t) = a(t)A(0), \quad (3.22)$$

wobei $a(t)$ eine komplexe skalare Funktion ist. In diesem Fall ändert sich der Operatorcharakter nicht, die Dynamik des Operators $A(t)$ wird durch die Funktion $a(t)$ beschrieben. Unter dieser Voraussetzung kommutiert der Operator zu zwei beliebigen Zeiten t_1 und t_2 , die Gleichung

$$[A(t_1), A(t_2)] = 0 \quad (3.23)$$

ist also immer erfüllt. Dann kann eine Differentialgleichung wie die Bestimmungsgleichung für $U_D(t)$ (2.37) analytisch gelöst werden.

Der zweite Typ von Operatoren kann nicht durch Gleichung (3.22) beschrieben werden. In dem Fall verschwindet der Kommutator zu verschiedenen beliebigen Zeiten im Allgemeinen nicht. Formal kann dann die Lösung mit Gleichung (2.26) angegeben werden. Für explizite Rechnungen hilft diese Form aber nicht weiter.

Wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben kann die Dyson-Reihe genutzt werden, um den Operator $U_D(t)$ näherungsweise zu bestimmen. Diese Methode ist relativ aufwändig. Schwerwiegender ist die Tatsache, dass die so bestimmte Näherung nicht unitär ist. Diese Eigenschaft ist aber wesentlich für alle Zeitentwicklungsoperatoren. Daher soll ein anderer Ansatz verwendet werden.

Der Mathematiker Magnus hat in Referenz [16] einen Algorithmus zur Lösung von Differentialgleichungen wie (2.37) entwickelt. Die Lösung der Gleichung kann in der Form

$$U_D(t) = \exp(\Omega(t)), \quad \text{mit } \Omega(0) = 0 \quad (3.24)$$

geschrieben werden. Zur Bestimmung des Operators $\Omega(t)$ wird die in Referenz [10] vorgestellte Methode genutzt, die hier kurz skizziert werden soll. Dabei wird $\Omega(t)$ mit der Differentialgleichung

$$\frac{\Omega(t)}{dt} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} [\Omega(t), H_{1,D}(t)]_n \quad (3.25)$$

bestimmt, wobei B_n die Bernoulli-Zahlen und $[\Omega(t), H_{1,D}(t)]_n$ ein n -facher verschachtelter Kommutator sind.

Im hier betrachteten Fall kann insbesondere ausgenutzt werden, dass für den Wechselwirkungsanteil $H_1(t)$ gemäß Gleichung (2.8)

$$H_1(t) \propto \kappa \quad (3.26a)$$

gilt. Nach Gleichung (2.33) hat $H_1(t)$ im Diracbild die Form

$$H_{1,D}(t) = U_0(t)^\dagger H_1(t) U_0(t), \quad (3.26b)$$

womit direkt

$$H_{1,D}(t) \propto \kappa \quad (3.26c)$$

folgt, da der Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ nicht von der Kopplung κ abhängt. Nach der Definition in Gleichung (3.25) kann $\Omega(t)$ in Ordnungen von κ entwickelt werden, also wird die Darstellung

$$\Omega(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \Omega^{(n)}(t) \quad \text{mit } \Omega^{(n)} \propto \kappa^n \quad (3.27)$$

genutzt. Die Operatoren $\Omega^{(n)}(t)$ sind ihrerseits durch Integralgleichungen definiert. Für diese wird die Größe

$$S_j^{(n)}(t) = \sum_{m=1}^{n-j} [\Omega^{(m)}(t), S_{j-1}^{(n-m)}(t)] \quad \text{für } 2 \leq j \leq n-1 \quad (3.28a)$$

$$S_1^{(n)}(t) = [\Omega^{(n-1)}(t), -iH_{1,D}(t)] \quad (3.28b)$$

rekursiv definiert. Damit kann für $\Omega^{(n)}(t)$ die Formel

$$\Omega^{(n)}(t) = \begin{cases} -i \int_0^t dt_1 H_{1,D}(t_1) & \text{für } n = 1 \\ \sum_{j=1}^{n-1} \frac{B_j}{j!} \int_0^t dt_1 S_j^{(n)}(t_1) & \text{für } n \geq 2 \end{cases} \quad (3.29)$$

angegeben werden. Für die ersten beiden Glieder der Reihe (3.27) gilt explizit

$$\Omega^{(1)}(t) = -i \int_0^t dt_1 H_{1,D}(t_1) \quad (3.30a)$$

$$\Omega^{(2)}(t) = (-i)^2 \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [H_{1,D}(t_1), H_{1,D}(t_2)] \quad (3.30b)$$

Höhere Ordnungen sind aufwändiger zu berechnen, da verschachtelte Kommutatoren auftreten. Durch den hier skizzierten und in Referenz [10] hergeleiteten Algorithmus ist eine systematische Methode zur Berechnung gegeben.

Der wesentliche Vorteil dieser Berechnungsmethode ist die Erhaltung der Unitarität von $U_D(t)$ in jeder Ordnung der Reihe in Gleichung (3.27). Der Grund hierfür ist, dass alle Elemente $\Omega_n(t)$ antihermitesch sind, also die Relation

$$\Omega_n^\dagger(t) = -\Omega_n(t) \quad (3.31)$$

erfüllen. Dies gilt allgemein für alle hermiteschen Operatoren $H_{1,D}(t) = H_{1,D}(t)^\dagger$, soll hier aber explizit am Beispiel des verwendeten Operators beschrieben werden.

Nach Konstruktion setzt sich das Element $\Omega_n(t)$ aus n -fachen Kommutatoren von $H_{1,D}(t)$ zu verschiedenen Zeiten zusammen. Der Operator $H_{1,D}(t)$ kann als Skalarprodukt eines reellen Vektors und dem Vektor der Spinoperatoren geschrieben werden. Mit den Überlegungen in den Gleichungen (3.3) und (3.25) folgt, dass ein Kommutator der n -ten Ordnung den Faktor i^{n+1} besitzt. Zusätzlich tritt der Faktor $(-i)^n$ in $\Omega^{(n)}(t)$ auf, wegen des Vorfaktors in der Differentialgleichung (2.37). Durch beide Faktoren hat jedes Glied in der Reihe (3.27) einen imaginären Vorfaktor. Die auftretenden Spinoperatoren sind hermitesch. Durch die Konjugation ändert sich also das Vorzeichen des Ausdrucks, womit wiederum die Unitarität von $U_D(t)$ gewährleistet ist.

In der Arbeit wird die Reihe nach der ersten Ordnung abgebrochen. Dies wird durch den kleinen Kopplungsparameter κ begründet. Außerdem ermöglicht der Abbruch in erster Ordnung die Einführung effektiver gaußverteilter Fluktuationen $\mathbf{v}(t)$, womit die Berechnungen der Mittelwerte bezüglich der Fluktuationen stark vereinfacht werden. Für höhere Ordnungen wird die Berechnung komplizierter.

3.4 Frobeniusnorm

Die untersuchten Korrelationsmatrizen $\mathbf{C}$ sind Elemente des $\mathbb{R}^3$, somit besitzen sie neun Elemente. In dieser Arbeit wird die Korrelationsmatrix mit verschiedenen Methoden berechnet. Die Abweichungen zwischen den berechneten Korrelationsmatrizen können in einer Differenzmatrix der Form

$$\Delta\mathbf{C} = \mathbf{C} - \mathbf{C}' \quad (3.32)$$

zusammengefasst werden. Für eine übersichtliche Untersuchung sollen alle Matrixelemente von $\Delta\mathbf{C}$ in einer skalaren Größe zusammengefasst werden, wofür die Frobeniusnorm genutzt wird. Sie ist durch die Wurzel der Summe der Betragsquadrate aller Elemente definiert, es gilt also

$$\|\Delta\mathbf{C}\|_F := \sqrt{\sum_{i,j=1}^3 (C_{ij} - C'_{ij})^2} = \sqrt{\text{Tr} \{ \Delta\mathbf{C}^T \Delta\mathbf{C} \}}. \quad (3.33)$$

Die Frobeniusnorm kann also als eine Art harmonisches Mittel aller Abweichungen interpretiert werden.

Kapitel 4

Spezialfälle und Grundlagen

Der vorgestellte Hamiltonoperator im Hochtemperatur-Limes kann für spezielle Parameter-Wahlen leicht analytisch gelöst werden. Diese Fälle werden in diesem Kapitel vorgestellt und analysiert.

4.1 Verschwindene Störung

Der einfachste Fall liegt vor, wenn die Störung durch die Umgebung verschwindet, also in Gleichung (2.8) $\kappa = 0$ gilt. Der Spin wechselwirkt nur mit dem externen Feld, was einem vollständig isolierten Spin entspricht. Prinzipiell ist diese Vorstellung unrealistisch. Trotzdem sind die hier vorgestellten Ergebnisse nützlich, da sie später verwendet werden (siehe Kapitel 5). Außerdem soll dieser Fall der Vollständigkeit halber vorgestellt werden.

Aus Gleichung (2.8) folgt unmittelbar

$$H(t) = H_0 = -\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \frac{\varepsilon}{2}\sigma_1 \quad (4.1)$$

Der Hamiltonoperator ist zeitunabhängig. Damit kann der Zeitentwicklungsoperator $U_0(t)$ analytisch bestimmt werden. Er hat die Form

$$U_0(t) = e^{-iH_0t} = \exp\left[-i\frac{\omega_0 t}{2}(c\sigma_1 - s\sigma_3)\right] \quad (4.2)$$

Mit der vollständigen Kenntnis der Zeitentwicklung können alle zeitabhängigen Spinoperatoren bestimmt werden. Dafür wird die Matrix aus Gleichung (3.8) genutzt. Explizit bedeutet das

$$\Sigma_0(t) = \frac{1}{\omega_0^2} \begin{pmatrix} \Delta^2 \cos(\omega_0 t) + \varepsilon^2 & \Delta\omega_0 \sin(\omega_0 t) & \varepsilon\Delta(\cos(\omega_0 t) - 1) \\ -\Delta\omega_0 \sin(\omega_0 t) & \omega_0^2 \cos(\omega_0 t) & -\varepsilon\omega_0 \sin(\omega_0 t) \\ \varepsilon\Delta(\cos(\omega_0 t) - 1) & \varepsilon\omega_0 \sin(\omega_0 t) & \varepsilon^2 \cos(\omega_0 t) + \Delta^2 \end{pmatrix} \sigma \quad (4.3a)$$

$$\sigma(t) = \Sigma_0(t)\sigma. \quad (4.3b)$$

Die Matrix $\mathbf{\Sigma}_0(t)$ beschreibt anschaulich eine Drehung im Spinraum, um die durch ω_0 ausgezeichnete Achse.

Zur Berechnung der Korrelationsmatrix $\mathbf{C}$ wird Gleichung (4.3b) komponentenweise betrachtet, also gilt für das Matrixelement C_{ij}

$$C_{ij} = \overline{\langle \sigma_i(t) \rangle} = \overline{\mathbf{e}_i^T \mathbf{\Sigma} \boldsymbol{\sigma} \sigma_i} = \mathbf{e}_i^T \mathbf{\Sigma} \mathbf{e}_j, \quad (4.4)$$

wobei die Eigenschaft $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \delta_{ij}$ der Paulimatrizen ausgenutzt wird. Die gesuchte Korrelationsmatrix $\mathbf{C}(t)$ entspricht in diesem Fall also gerade der Drehmatrix $\mathbf{\Sigma}_0(t)$, da keine Mittelung bezüglich der Zufallsvariable $\eta(t)$ nötig ist. Die gesuchte effektive Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ hat nach Gleichung (2.48) die Form

$$\mathbf{P}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega_0 t) & -\sin(\omega_0 t) \\ 0 & \sin(\omega_0 t) & \cos(\omega_0 t) \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Die Form ist unabhängig vom Winkel α , wie durch die Konstruktion der Matrix $\mathbf{P}$ auch zu erwarten ist. Denn die Rotation in Gleichung (2.48) hebt die Abhängigkeit vom Winkel auf. Die Korrelationen sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Kurven zeigen ein typisches oszillatorisches Verhalten, sie zerfallen aber nicht. Wie erwartet tritt also bei fehlender Kopplung an die Umgebung keine Dekohärenz auf.

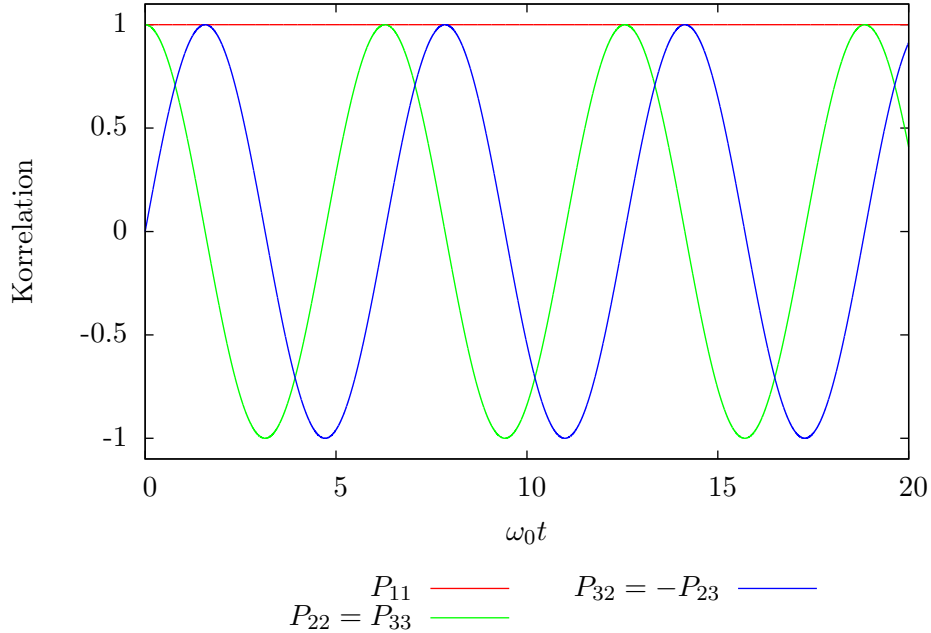


Abbildung 4.1: Die Elemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ für einen isolierten Spin.

4.2 Externes Feld

Spezielle Wahlen des externen Feldes ermöglichen eine analytische Berechnungen des Zeitentwicklungsoperators $U(t)$. Die wesentliche Bedingung für eine analytische Lösung ist ein verschwindendes longitudinales Feld, wodurch σ_1 eine Erhaltungsgröße ist.

4.2.1 Verschwindendes externes Feld

Für ein verschwindendes externes Feld folgt für den Hamiltonoperator (2.8)

$$H(t) = H_\eta(t) = \frac{\kappa}{2}\eta(t)\sigma_1. \quad (4.6)$$

Die Spinoperatoren können mit der Formel (3.6b) berechnet werden. Dafür wird der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ benötigt, der im Fall eines verschwindenden externen Feldes analytisch berechnet werden kann, weil der Operator $H_1(t)$ zu beliebigen Zeiten mit sich selbst kommutiert. Die Zeitordnung in Gleichung (2.26) wird also nicht benötigt. Für den Operator $U(t)$ gilt unmittelbar

$$U(t) = \exp\left(-i \int_0^t H_\eta(t_1) dt_1\right) = \exp\left(-i \int_0^t \eta(t_1) dt_1 \frac{\kappa}{2}\sigma_1\right) = \exp\left(-iv(t) \frac{\kappa}{2}\sigma_1\right) \quad (4.7)$$

Für weitere Rechnungen wird die neue Zufallsvariable v benutzt, wie sie in Gleichung (3.15) definiert ist. Da der Vektor $\mathbf{a}$ aus der allgemeinen Formel eindimensional ist, kann die Berechnung der Korrelationen analytisch durchgeführt werden. Zur Bestimmung der Verteilungsfunktion $P(v)$ muss nur die Varianz $G(t)$ bekannt sein. Für die beiden Größen gilt hier

$$P(v) = \sqrt{\frac{1}{2\pi G(t)}} e^{-\frac{v^2}{2G(t)}} \quad (4.8a)$$

$$G(t) = \overline{v(t)v(t)} = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \quad (4.8b)$$

Für den Fall einer exponentiell zerfallenden Korrelationsfunktion $g(t) = e^{-\Omega t}$ gilt für die Varianz $G(t)$ speziell

$$G(t) = 2\kappa^2 \left(\frac{t}{\Omega} + \frac{e^{-\Omega t} - 1}{\Omega^2} \right) \quad (4.9)$$

Für die Rotationsmatrix $\Sigma(t)$ folgt mit Formel (3.8) und dem bekannten Operator $U(t)$

$$\Sigma(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\kappa v(t)) & -\sin(\kappa v(t)) \\ 0 & \sin(\kappa v(t)) & \cos(\kappa v(t)) \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Zur Bestimmung der Spinkorrelationen muss die Matrix $\Sigma(t)$ bezüglich der Fluktuationen $v(t)$ gemittelt werden. Dies wird gemäß der Formel (3.21) berechnet. Als Verteilungsfunktion wird die in Gleichung (4.8a) angegeben Funktion verwendet. In diesem

Fall kann die Berechnung analytisch durchgeführt werden. Die Mittelung über den Sinus verschwindet, da der Sinus eine ungerade Funktion ist. Die entsprechende Rechnung für den Kosinus ist im Appendix vorgestellt, siehe Gleichung A.8d. Das Ergebnis ist

$$\mathbf{C}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{G(t)}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{G(t)}{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

In diesem Fall kann keine effektive Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ definiert werden, da kein externes Feld vorliegt. Daher wird die Matrix $\mathbf{C}$ untersucht.

Die Komponente C_{11} ist konstant, da der Spinoperator σ_1 eine Erhaltungsgröße ist. Die beiden übrigen endlichen Komponenten $C_{22} = C_{33}$ zerfallen durch die Kopplung an das fluktuierende Feld exponentiell, wobei die Lebenszeit durch die Zeitkonstante Ω der Autokorrelationsfunktion $g(t)$ und die Kopplungsstärke κ beeinflusst wird. In Abbildung 4.2 kann erkannt werden, dass ein wachsendes Ω die Lebenszeit der Korrelation erhöht. Dies kann auch aus Gleichung (4.9) geschlossen werden. Für den Grenzwert $\Omega \rightarrow 0$ folgt nämlich

$$G(t) = \kappa^2 t^2 \quad \text{für } \Omega = 0 \quad (4.12)$$

wie mit einer entsprechenden Grenzwertbetrachtung leicht erkannt werden kann. Mit einem wachsenden Ω steigt die Funktion $G(t)$ dann immer schwächer an, für große Werte von Ω gilt näherungsweise

$$G(t) \approx \kappa^2 \frac{t - \Omega}{\Omega^2}, \quad (4.13)$$

$G(t)$ wächst also linear mit der Zeit. Dies führt dann direkt zu einer erhöhten Lebenszeit der Korrelationen im Vergleich zum Grenzwert $\Omega = 0$.

4.2.2 Rein transversales Feld

Wenn im Hamiltonoperator der Winkel $\alpha = 0$ gewählt wird, bleibt die analytische Rechnung auch für ein endliches externes Feld möglich. Der Hamiltonoperator hat dann die Form

$$H(t) = \frac{\varepsilon}{2} \sigma_1 + \frac{\kappa}{2} \eta(t) \sigma_1 = \frac{\varepsilon + \kappa \eta(t)}{2} \sigma_1. \quad (4.14)$$

Der Hamiltonoperator kommutiert zu verschiedenen Zeiten, daher kann der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ wieder analytisch bestimmt werden. Für $U(t)$ gilt

$$U(t) = \exp \left(-i \int_0^t H(t_1) dt_1 \right) = \exp \left(-i \frac{\varepsilon t + v(t)}{2} \sigma_1 \right) \quad (4.15)$$

Die auftretende Fluktuation $v(t)$ besitzt die gleiche Varianz $G(t)$ und die gleiche Verteilungsfunktion $P(v)$ wie in Abschnitt 4.2.1.

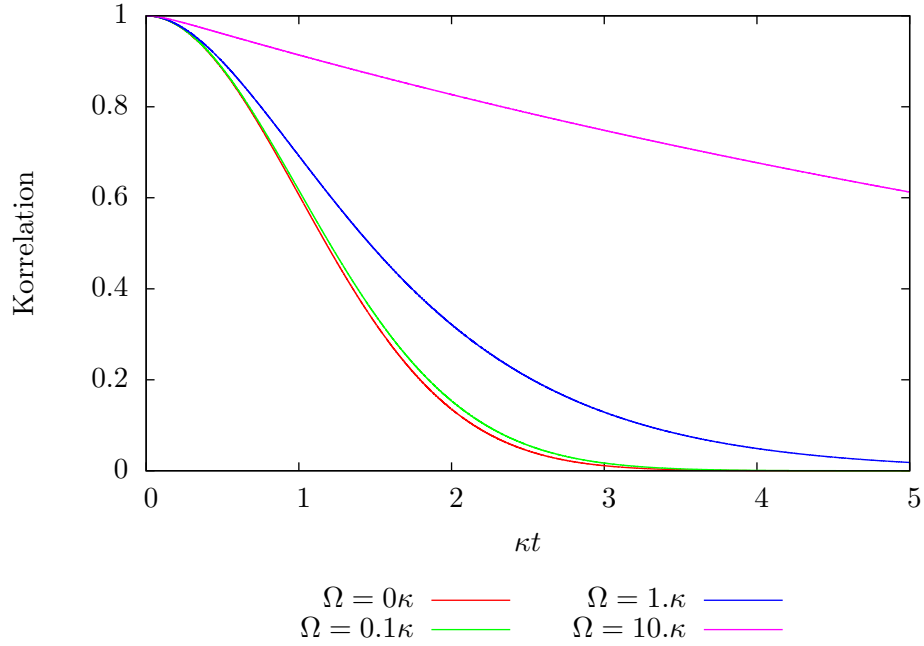


Abbildung 4.2: Die Korrelation $C_{22} = C_{33}$ für verschiedene Zeitkonstanten Ω der Korrelationsfunktion $g(t)$. Das System besitzt kein externes Feld.

Die Berechnung der Rotationsmatrix $\mathbf{\Sigma}(t)$ ergibt

$$\mathbf{\Sigma}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varepsilon t + v(t)) & -\sin(\varepsilon t + v(t)) \\ 0 & \sin(\varepsilon t + v(t)) & \cos(\varepsilon t + v(t)) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Zur Mittelung der Matrix in Gleichung (4.16) werden die trigonometrischen Funktionen zerlegt. Explizit gilt also

$$\cos(\varepsilon t + v(t)) = \cos(\varepsilon t) \cos(v(t)) - \sin(\varepsilon t) \sin(v(t)) \quad (4.17a)$$

$$\sin(\varepsilon t + v(t)) = \sin(\varepsilon t) \cos(v(t)) + \cos(\varepsilon t) \sin(v(t)) \quad (4.17b)$$

Damit müssen die selben Ausdrücke wie in Abschnitt 4.2.1 gelöst werden. Die gesuchte Korrelationsmatrix hat die Gestalt

$$\mathbf{C}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varepsilon t) e^{-\frac{G(t)}{2}} & -\sin(\varepsilon t) e^{-\frac{G(t)}{2}} \\ 0 & \sin(\varepsilon t) e^{-\frac{G(t)}{2}} & \cos(\varepsilon t) e^{-\frac{G(t)}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Im betrachteten Fall $\alpha = 0$ gilt $\mathbf{P} = \mathbf{C}$, weshalb keine weitere Rechnung mehr nötig ist.

Die Form der Korrelationen hat sich im Vergleich zum Fall ohne Kopplung geändert. Die Komponenten oszillieren und zerfallen. Damit wird bestätigt, dass die Kopplung an ein fluktuierendes klassisches Feld zu Dekohärenz führt. Durch Veränderung der Parameter κ und Ω kann die Zerfallsgeschwindigkeit wie im vorigen Fall verändert werden. In Abbildung 4.3 sind die Elemente der Korrelationsmatrix für die Parameter $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ dargestellt.

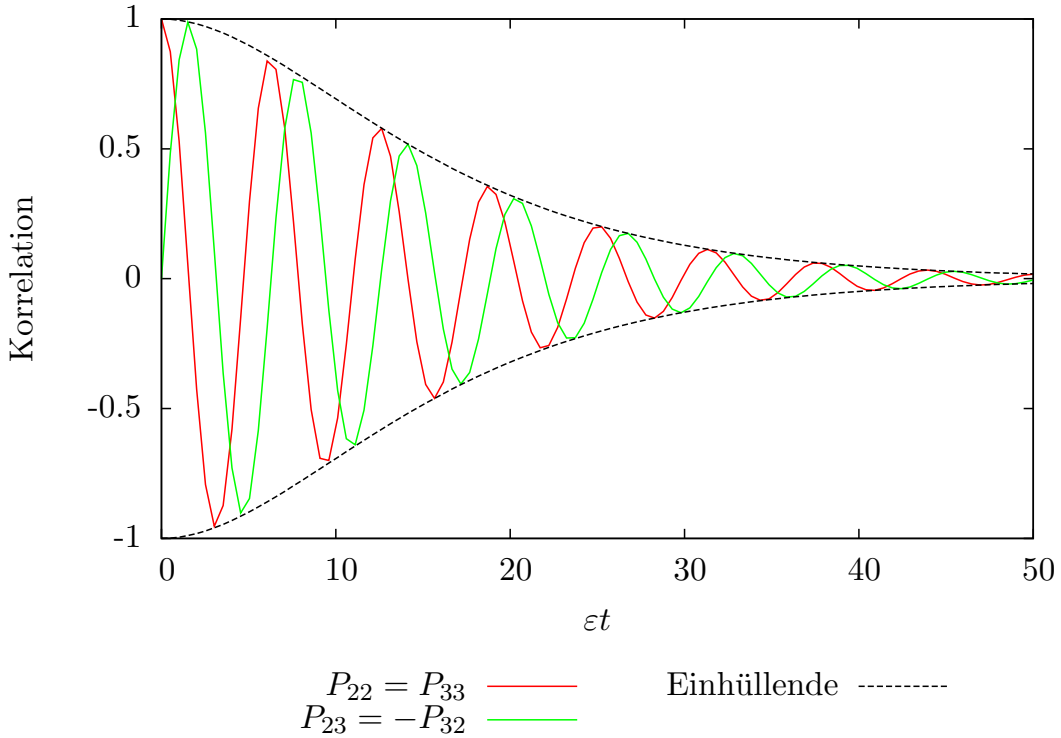


Abbildung 4.3: Die Elemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ für ein transversales Feld ($\alpha = 0$) und Kopplung an die Umgebung. Zusätzlich ist die Einhüllende aufgetragen. Für die Parameter wird $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

4.3 Konstantes Rauschen

Für das gegebene System ist der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ bei einer zeitunabhängigen Fluktuation $\eta(t) = \eta(0)$ direkt berechenbar. Die Korrelationsfunktion $g(t)$ der Fluktuationen ist dann ebenfalls konstant. Die Verteilungsfunktion $P(\eta)$ ist

$$P(\eta) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-\frac{\eta^2}{2}}, \quad (4.19)$$

da anders als in Kapitel 3.2 wegen der fehlenden Zeitabhängigkeit kein Vektor $\boldsymbol{\eta}$ zur Beschreibung benötigt wird.

Für $U(t)$ gilt

$$U(t) = \exp \left(-i \frac{-\Delta t \sigma_3 + (\varepsilon + \kappa \eta) t \sigma_1}{2} \right) \quad (4.20)$$

Der hier berechnete Operator $U(t)$ hat die gleiche Form wie $U_0(t)$ (siehe Gleichung (4.2)), die Rotationsfrequenz ist allerdings eine andere. Im ungestörten System dreht sich der Spin mit der Frequenz ω_0 . Bei einer Störung mit zeitunabhängigen Fluktuationen dreht er sich mit der Frequenz ω . Für diese gilt

$$\omega = \sqrt{\Delta^2 + (\varepsilon + \kappa \eta)^2} = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\varepsilon}^2}, \quad (4.21)$$

wobei die Abkürzung $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + \kappa \eta$ verwendet wird.

Für die Rotationsmatrix $\boldsymbol{\Sigma}(t)$ folgt mit Formel (3.8)

$$\boldsymbol{\Sigma}(t) = \frac{1}{\omega^2} \begin{pmatrix} \Delta^2 \cos(\omega t) + \tilde{\varepsilon}^2 & \Delta \omega \sin(\omega t) & \tilde{\varepsilon} \Delta (\cos(\omega t) - 1) \\ -\Delta \omega \sin(\omega t) & \omega^2 \cos(\omega t) & -\tilde{\varepsilon} \omega \sin(\omega t) \\ \tilde{\varepsilon} \Delta (\cos(\omega t) - 1) & \tilde{\varepsilon} \omega \sin(\omega t) & \tilde{\varepsilon}^2 \cos(\omega t) + \Delta^2 \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Zur Bestimmung der Korrelationsmatrix muss die Matrix gemittelt werden. Die nötigen Gaußintegrationen können numerisch durchgeführt werden. Explizit gilt dabei mit der Verteilungsfunktion $P(\eta)$ in Gleichung (4.19)

$$\boldsymbol{C} = \int_{\mathbb{R}} d\eta \boldsymbol{\Sigma}(t) P(\eta) \quad (4.23)$$

Die resultierende Matrix $\boldsymbol{C}$ wird mit Gleichung (2.48) zur effektiven Korrelationsmatrix $\boldsymbol{P}$ transformiert. Die Komponenten P_{ij} sind in den Abbildungen 4.4 und 4.5 für die Parameter $\alpha = 1/4\pi$ und $\kappa = 0.1\omega_0$ dargestellt. Die Autokorrelationen P_{ii} ähneln den entsprechenden Korrelationen aus Abbildung 4.1, zeigen aber einen Zerfall. Die Kurven von P_{22} und P_{33} unterscheiden sich etwas, anders als im Fall einer verschwinden Kopplung wo Gleichheit gilt.

Für $\kappa = 0$ verschwinden die Elemente P_{12} , P_{21} , P_{13} und P_{31} , nicht aber für $\kappa > 0$. In Abbildung 4.5 kann erkannt werden, dass die Korrelationen endlich sind und Oszillationen zeigen. Sie sind im Vergleich zu den übrigen Korrelationen aber schwach, mit maximalen Amplituden von weniger als 0.05.

Im betrachteten Zeitbereich scheinen alle Korrelationen außer P_{11} vollständig zu zerfallen. Allerdings zeigt die logarithmische Darstellung der Beträge $|P_{ij}|$ in den Abbildungen 4.6 und 4.7, dass dies nicht zutrifft. Die Korrelationen P_{33} , P_{13} und P_{31} besitzen ebenfalls einen endlichen Grenzwert.

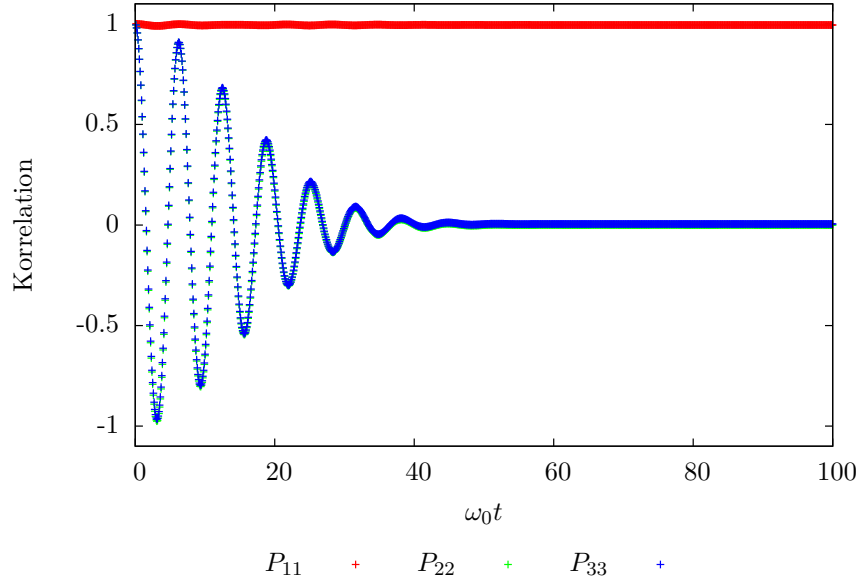


Abbildung 4.4: Die Diagonalelemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$. Die Parameter sind als $\alpha = 1/4\pi$ und $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

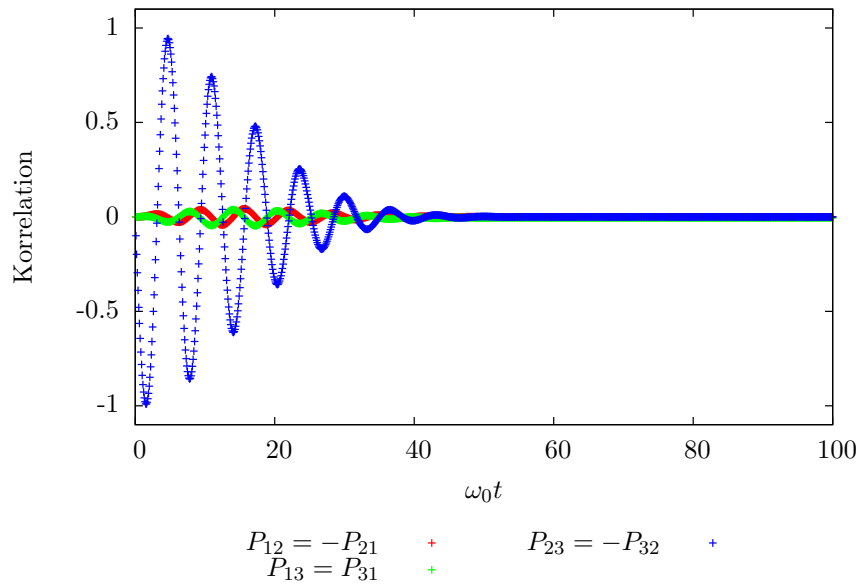


Abbildung 4.5: Die Nichtdiagonalelemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$. Die Parameter sind als $\alpha = 1/4\pi$ und $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

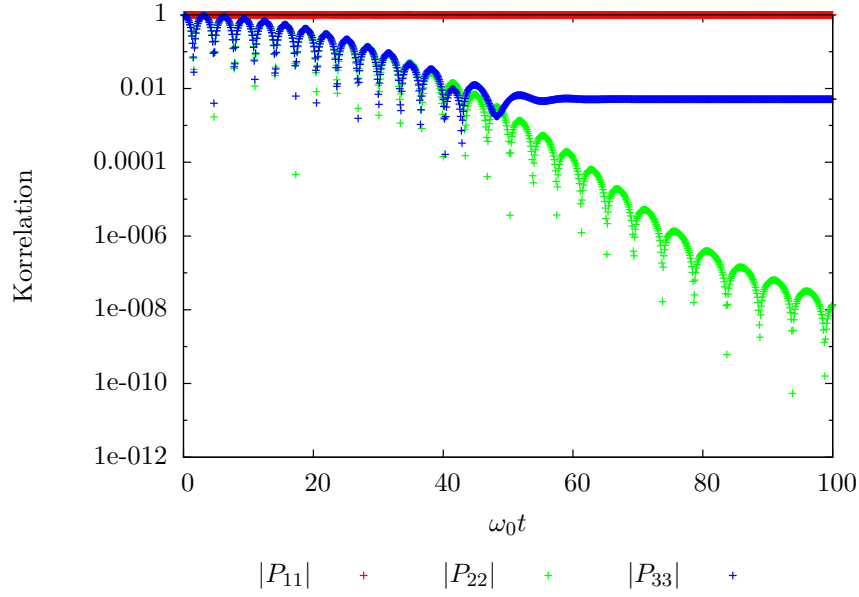


Abbildung 4.6: Die Diagonalelemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ in logarithmischer Darstellung. Die Parameter sind als $\alpha = 1/4\pi$ und $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

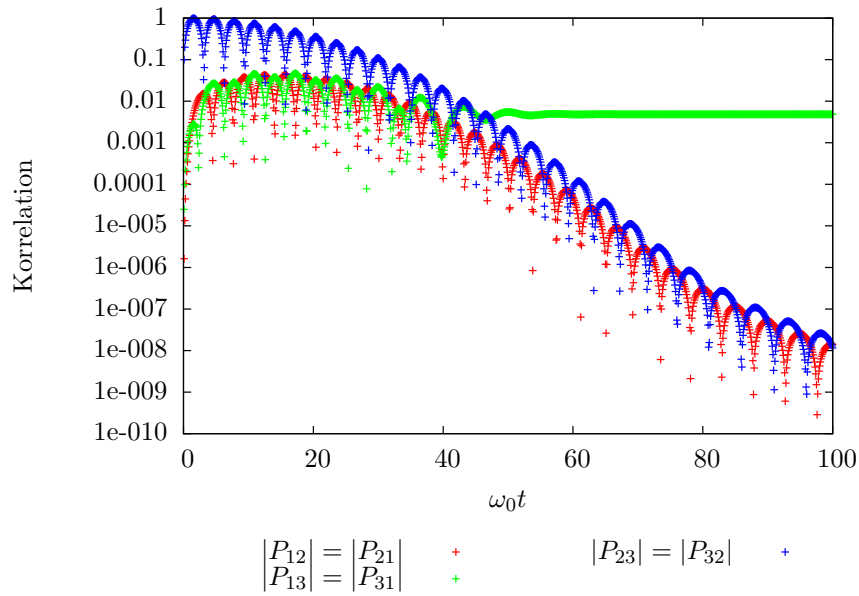


Abbildung 4.7: Die Nichtdiagonalelemente der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ in logarithmischer Darstellung. Die Parameter sind als $\alpha = 1/4\pi$ und $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

Für einen Vergleich in Kapitel 5 soll das Verhalten der Korrelation P_{11} für verschiedene Parameter α und κ untersucht werden. Dafür werden die berechneten Kurven in der Abbildungen 4.8 und 4.9 dargestellt. Hierbei wird die Abhängigkeit vom Winkel α bei einer konstanten Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ und die Abhängigkeit von κ für den festen Winkel $\alpha = 1/4\pi$ dargestellt.

Für einen steigenden Winkel α sinkt der Grenzwert ab, allerdings ist der Effekt vergleichsweise schwach. Für $\alpha = 0$ ist $P_{11} = 1$ für alle Zeiten, beim Winkel $\alpha = 3/8\pi$ liegt der Wert nur um etwa 0.8% niedriger. Neben der Veränderung des Grenzwertes wird durch den Winkel auch die Konvergenzgeschwindigkeit beeinflusst. Die Oszillationen von P_{11} sind für die Winkel $\alpha < 3/8\pi$ im betrachteten Zeitbereich schon ausgestorben, anders als bei den Kurven mit $\alpha \geq 3/8$.

Die Kopplung κ hat einen stärkeren Effekt auf den Grenzwert. Für eine steigende Kopplung nimmt dieser ab. Dabei sinkt aber die Konvergenzgeschwindigkeit deutlich. Für $\kappa < 0.3\omega_0$ können keine Oszillationen mehr erkannt werden. Bei den höheren Kopplungen sind hingegen auch für die relativ hohen Zeiten immer noch starke Oszillationen erkennbar.

Bemerkenswert ist die Tatsache, dass die Frequenz der Oszillationen scheinbar nicht von der Kopplung κ abhängt. Man kann eine schwache Abhängigkeit erwarten, die in den Bildern nicht erkennbar ist. Denn die Rotationsfrequenz ω des System hängt eindeutig von der Kopplung κ , was die Vermutung nahe legt, dass eine funktionale Abhängigkeit bestehen sollte.

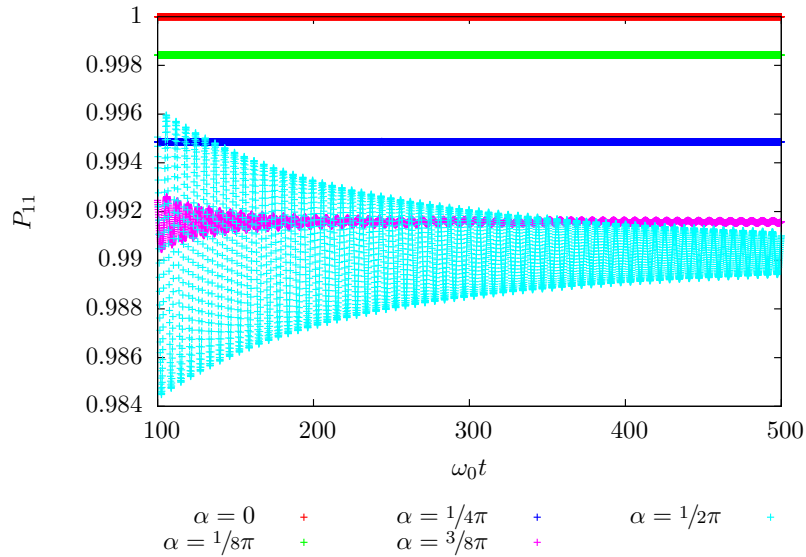


Abbildung 4.8: Korrelationselemente für ein transversales Feld ($\alpha = 0$) und Störung. Zusätzlich ist die Einhüllende aufgetragen.

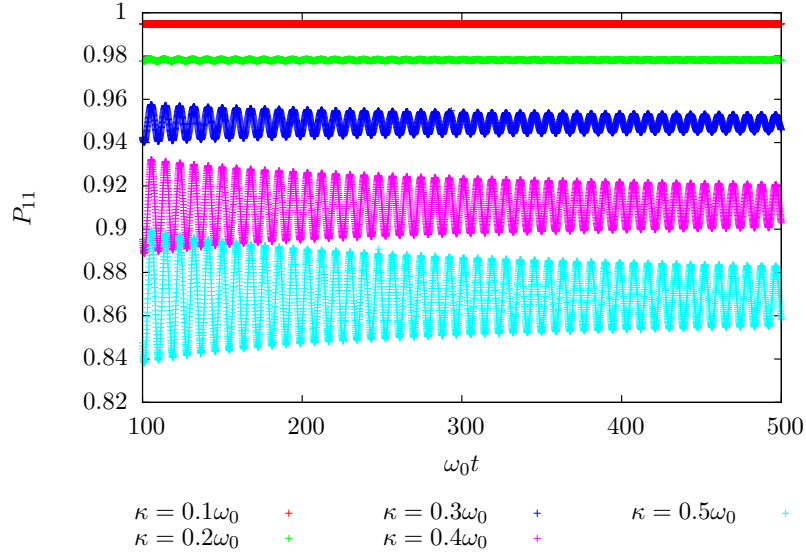


Abbildung 4.9: Korrelationselemente für ein transversales Feld ($\alpha = 0$) und Störung. Zusätzlich ist die Einhüllende aufgetragen.

4.4 Grundlagen für den allgemeinen Fall

Die gesuchte Größe ist die effektive Korrelationsmatrix der drei Spinoperatoren in Gleichung (2.46). Da es sich bei den Korrelationen um dynamische Größen handelt, ist die Kenntnis des Zeitentwicklungsoperators $U(t)$ wesentlich. Für geeignete Wahlen der Systemparameter ist $U(t)$ analytisch bestimmbar, wie in den ersten Abschnitten dieses Kapitels gezeigt wurde. Bei beliebigen Parametern kann im Allgemeinen hingegen kein geschlossener Ausdruck angegeben werden.

Entsprechend der physikalischen Situation kann der betrachtete Hamiltonoperator in zwei Teile zerlegt werden. Der erste Teil beschreibt die Wirkung des externen Feldes. Die induzierte Dynamik kann analytisch berechnet werden (siehe Kapitel 4.1). Der zweite Teil ist durch die Wechselwirkung mit der Umgebung gegeben.

Für solche Probleme ist die Zerlegung des Operators $U(t)$ in diese zwei Teile sinnvoll. Die Dynamik des ungestörten Systemes wird durch den Operator $U_0(t)$ beschrieben. Der entsprechende Operator für die Wechselwirkung ist der Zeitentwicklungsoperator im Diracbild $U_D(t)$. Die nötigen Rechnungen sind in Kapitel 2.2.3 durchgeführt. Das Ergebnis

$$U(t) = U_0(t)U_D(t) \quad (4.24)$$

soll genutzt werden, um die zeitabhängigen Spinoperatoren zu nähern.

Der Operator $U_0(t)$ ist in Kapitel 4.1 berechnet worden. Da H_0 nicht von der Zeit abhängt, sind die entsprechenden Rechnungen analytisch durchführbar. Für den Ope-

rator $U_D(t)$ gilt entsprechend der Gleichung (2.37)

$$\partial_t U_D(t) = -iH_{1,D}(t)U_D(t) \quad (4.25)$$

Als nächstes muss also der Wechselwirkungsanteil $H_1(t)$ im Dirac-Bild berechnet werden. Dabei gilt

$$H_{1,D}(t) = U_0^\dagger(t)H_1(t)U_0(t) = \frac{\kappa}{2}\eta(t)U_0^\dagger(t)\sigma_1U_0(t) \stackrel{(4.3a)}{=} \frac{\kappa}{2}\eta(t)\mathbf{e}_1\mathbf{T}\Sigma_0(t)\boldsymbol{\sigma} \quad (4.26)$$

Die Spinoperatoren im Dirac-Bild können aus Gleichung (4.3a) abgelesen werden. Der dort behandelte Fall geht von einer fehlenden Kopplung an die Umgebung aus.

Der resultierende Operator $H_{1,D}(t)$ kommutiert zu verschiedenen Zeiten im allgemeinen nicht. Daraus folgt direkt, dass $U_D(t)$ nicht analytisch berechnet werden kann. In diesem Kapitel wird eine Näherungslösung für kleine Zeiten hergeleitet. In Kapitel 5 wird unter Ausnutzung der Magnus-Entwicklung eine alternative Näherungslösung bestimmt. Eine dritte Möglichkeit ist die numerische Simulation des Zeitentwicklungsoperators $U_D(t)$, wie in Kapitel 6 vorgestellt.

4.4.1 Berechnung der Korrelationsmatrix

Mithilfe der bisherigen Schritte können die zeitabhängigen Spinoperatoren bestimmt werden. Mit diesen können dann die gesuchten Korrelationen berechnet werden. Aus Gleichung 2.37 folgt für die Spinoperatoren

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = U_D^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}_D(t)U_D(t) \quad (4.27a)$$

Die Spinoperatoren im Diracbild sind in Kapitel 4.1 berechnet, da der dort verwendete Hamiltonoperator gerade der freie Anteil des Systems ist. Die Matrix $\Sigma_0(t)$ kommutiert dabei mit dem Operator $U_D(t)$, womit

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \Sigma_0(t)U_D^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}U_D(t) \quad (4.27b)$$

folgt. Durch die Definition des Vektors

$$\mathbf{s}(t) := U_D^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}U_D(t) \quad (4.28)$$

kann der zeitabhängige Spinoperator als

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \Sigma_0(t)\mathbf{s} \quad (4.29)$$

geschrieben werden. Die analytisch beschreibbare Anteil der Dynamik ist in der Matrix $\Sigma_0(t)$ enthalten.

Mit Gleichung (3.8) gilt offenbar für den Vektor $\mathbf{s}(t)$ auch die Darstellung

$$\mathbf{s}(t) = \Sigma_D\boldsymbol{\sigma} \quad (4.30)$$

wobei die Matrix $\Sigma_D(t)$ die Dynamik der Spinoperator σ beschreibt, die der Zeitentwicklungsoperator $U_D(t)$ induziert. Für den vollen Zeitabhängigkeit des Spinoperators folgt dann

$$\sigma(t) = \Sigma_0 \Sigma_D(t) \sigma \quad (4.31)$$

Die Korrelationsmatrix C ist komponentenweise definiert. Daher wird die Komponentendarstellung von Gleichung (4.31) benötigt. Diese ist

$$\sigma_i(t) = e_i^T \Sigma_0 \Sigma_D(t) \sigma. \quad (4.32)$$

Mit den Spinoperatoren kann nun die Korrelationsmatrix $C(t)$ bestimmt werden. Dabei wird ausgenutzt, dass die Paulimatrizen spurfrei sind. Also gilt

$$\langle \sigma_i(t) \sigma_j \rangle = e_i^T \Sigma_0 \Sigma_D(t) \langle \sigma \sigma_j \rangle = e_i^T \Sigma_0 \Sigma_D(t) e_j \quad (4.33)$$

Damit folgt für die Elemente der Korrelationsmatrix

$$C_{ij} = \overline{\langle \sigma_i(t) \sigma_j \rangle} = \overline{e_i^T \Sigma_0 \Sigma_D(t) e_j} = e_i^T \Sigma_0 \overline{\Sigma_D(t)} e_j, \quad (4.34)$$

wobei ausgenutzt wird, dass nur die Matrix $\Sigma_D(t)$ von der Zufallsvariable $\eta(t)$ abhängt. Die gemittelte Matrix $\Sigma_D(t)$ wird im Folgenden durch

$$\mathbf{F}(t) := \overline{\Sigma_D(t)} \quad (4.35)$$

ausgedrückt. Die entsprechende Gleichung für die Korrelationsmatrix $C(t)$ ist offensichtlich

$$C(t) = \Sigma_0(t) \mathbf{F}(t). \quad (4.36)$$

Die Matrix $\mathbf{F}(t)$ wird in dieser Arbeit mit drei Methoden berechnet. Der erste Ansatz basiert auf einer Näherung des Vektors $\mathbf{s}(t)$, der die Dynamik von $\mathbf{F}(t)$ festlegt. Im nächsten Abschnitt wird hierfür ein Ansatz über eine Integralgleichung für kleine Zeiten hergeleitet.

Der zweite Ansatz verwendet die in Kapitel 3.3 vorgestellte Magnus-Entwicklung, um den Zeitentwicklungsoperator U_D zu nähern. Ziel der Näherung ist es eine analytische Berechnung der Spur zu ermöglichen. Dann muss nur noch über die Fluktuationen in $H_{1,D}(t)$ geeignet gemittelt werden.

Als letzter Ansatz wird der Operator $U_D(t)$ durch eine numerische Simulation bestimmt. Dabei wird keine Näherung verwendet, die Ergebnisse sind bis auf numerische und statistische Fehler also exakt.

4.4.2 Näherungslösung der Korrelationsmatrix für kleine Zeiten

Für eine Näherungslösung wird der Vektor $\mathbf{s}(t)$ abgeleitet. Mit Gleichung (4.30) folgt

$$\partial_t \mathbf{s}(t) = i U_D^\dagger(t) [H_{1,D}(t), \sigma] U_D(t) = \frac{\kappa}{2} \eta(t) U_D^\dagger(t) [e_1^T \Sigma_0(t) \sigma, \sigma] U_D(t). \quad (4.37a)$$

Mit der Formel (3.2) kann dies zu

$$\partial_t \mathbf{s}(t) = -\kappa \eta(t) \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{13}(t) & -\Sigma_{12}(t) \\ -\Sigma_{13}(t) & 0 & \Sigma_{11}(t) \\ \Sigma_{12}(t) & -\Sigma_{11}(t) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{s}(t) \quad (4.37b)$$

umgeformt werden. Die äquivalente Integralgleichung hat folglich die Form

$$\mathbf{s}(t) = \boldsymbol{\sigma} - \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{s}(t_1), \quad (4.37c)$$

wobei die Matrix

$$\mathbf{A}(t) := \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{13}(t) & -\Sigma_{12}(t) \\ -\Sigma_{13}(t) & 0 & \Sigma_{11}(t) \\ \Sigma_{12}(t) & -\Sigma_{11}(t) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

verwendet wird.

Die Integralgleichung (4.37c) kann nun im Kopplungsparameter κ entwickelt werden. Explizit gilt für $\mathbf{s}$ bis zur zweiten Ordnung

$$\mathbf{s} \approx \boldsymbol{\sigma} - \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \mathbf{A}(t_1) \boldsymbol{\sigma} + \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{A}(t_2) \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.39)$$

In dieser Näherung gilt für die Matrix $\Sigma_D(t)$ gemäß Gleichung (4.30)

$$\Sigma_D(t) = \mathbb{1} - \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \mathbf{A}(t_1) + \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{A}(t_2) \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.40)$$

Dieser Ausdruck kann bezüglich der Zufallsvariablen $\eta(t)$ leicht gemittelt werden, da die ersten beiden Momente in den Gleichungen (2.10a) und (2.10b) vorgegeben sind. Damit kann die analytische Näherungslösung

$$\mathbf{F}(t) \approx \overline{\Sigma_D(t)} = \mathbb{1} + \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 g(t_1 - t_2) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{A}(t_2) \boldsymbol{\sigma} =: \mathbf{F}_a(t) \quad (4.41)$$

für die Matrix $\mathbf{F}$ bestimmt werden. Dieses Ergebnis wird genutzt, um die Magnus-Entwicklung für kleine Zeiten zu überprüfen. Für eine exponentiell zerfallende Funktion $g(t)$ mit der Zeitkonstanten Ω ist die Matrix $\mathbf{F}_a(t)$ im Appendix C angegeben.

4.4.3 Effektive Korrelationsmatrix

Wie in Kapitel 2.2.5 beschrieben sollen die Korrelationsmatrix $\mathbf{P}(t)$ betrachtet werden. Die Matrix kann mit den bisherigen Umformungen in Abhängigkeit von der Matrix $\mathbf{F}(t)$ angegeben werden. Dafür wird die Beziehung (2.48) zwischen $\mathbf{P}$ und $\mathbf{C}$ genutzt und Gleichung (4.36) eingesetzt. Damit folgt

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{R}_\alpha \mathbf{C} \mathbf{R}_\alpha^\top = \mathbf{R}_\alpha \Sigma_0(t) \mathbf{F}(t) \mathbf{R}_\alpha^\top \quad (4.42a)$$

Da die Drehmatrix $\mathbf{R}_\alpha$ orthogonal ist, kann das Produkt $\mathbf{R}_\alpha^\top \mathbf{R}_\alpha = \mathbb{1}$ in die Gleichung eingefügt werden, womit

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{R}_\alpha \boldsymbol{\Sigma}_0(t) \mathbf{R}_\alpha^\top \mathbf{R}_\alpha \mathbf{F}(t) \mathbf{R}_\alpha^\top \quad (4.42b)$$

gilt. Mit Matrixmultiplikation und der Rotationsmatrix $\boldsymbol{\Sigma}_0(t)$ aus Gleichung (4.3a) kann schließlich die Beziehung

$$\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}_0(t) \mathbf{P}_D(t) \quad (4.42c)$$

bestimmt werden. Hierbei werden die Abkürzungen

$$\mathbf{P}_0(t) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega_0 t) & -\sin(\omega_0 t) \\ 0 & \sin(\omega_0 t) & \cos(\omega_0 t) \end{pmatrix} \quad (4.43a)$$

$$\mathbf{P}_D(t) := \begin{pmatrix} c^2 F_{11} - sc(F_{31} + F_{13}) + s^2 F_{33} & cF_{12} - sF_{32} & scF_{11} - s^2 F_{31} + c^2 F_{13} - scF_{33} \\ cF_{21} - sF_{23} & F_{22} & sF_{21} + cF_{23} \\ scF_{11} + c^2 F_{31} - s^2 F_{13} - scF_{33} & sF_{12} + cF_{32} & s^2 F_{11} + sc(F_{31} + F_{13}) + c^2 F_{33} \end{pmatrix} \quad (4.43b)$$

verwendet, wobei $c = \cos(\alpha)$ und $s = \sin(\alpha)$ entsprechend Gleichung (2.4) gilt.

Kapitel 5

Lösung mithilfe der Magnus-Entwicklung

In den mathematischen Grundlagen wurde die Magnus-Entwicklung vorgestellt (siehe Kapitel 3.3). Dieser Algorithmus kann genutzt werden, um eine Näherungslösung für die Matrix $\mathbf{F}$ in Gleichung (4.35) zu bestimmen. Wichtig ist hierbei, dass die Magnus-Reihe sinnvoll abgebrochen werden kann. Dies kann zum Beispiel durch einen kleinen Parameter begründet werden. In diesem Kapitel werden die nötigen Rechnungen und die entsprechenden Resultate dieser Näherung dargelegt.

5.1 Näherung des Zeitentwicklungsoperators

Für die Magnus-Reihe kann die einfache Algebra der Paulimatrizen ausgenutzt werden. Alle Terme in der Magnus-Reihe können als Kommutatoren von Skalarprodukten der Form $\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}$ aufgefasst werden, wobei $\mathbf{a}$ ein zeitabhängiger komplexer Vektor ist. Daher kann der Entwicklungsoperator immer in der Form

$$U_D(t) = \exp \left(-\frac{i}{2} \mathbf{v}(t) \boldsymbol{\sigma} \right) \quad (5.1)$$

dargestellt werden. Der Vektor $\mathbf{v}(t)$ fasst die Magnus-Reihenglieder zusammen, also kann von der Form

$$\mathbf{v} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{v}^{(n)} \quad (5.2)$$

ausgegangen werden. Dabei ist $\mathbf{v}^{(n)}$ der entsprechende Vektor des n -ten Magnus-Gliedes, also gilt insbesondere die Abhängigkeit

$$\mathbf{v}^{(n)} \propto \kappa^n. \quad (5.3)$$

Die ersten beiden Vektoren sind mit den Formeln (3.30a) und (3.30b)

$$\mathbf{v}^{(1)}(t) = \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \boldsymbol{\Sigma}_0(t_1) \mathbf{e}_1 = \kappa \int_0^t dt_1 \begin{pmatrix} s^2 \cos(\omega_0 t) + c^2 \\ s \sin(\omega_0 t) \\ sc (\cos(\omega_0 t) - 1) \end{pmatrix} \mathbf{e}_1 \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{v}^{(2)}(t) = \kappa^2 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \eta(t_2) \boldsymbol{\Sigma}_0(t_1) \mathbf{e}_1 \times \boldsymbol{\Sigma}_0(t_2) \mathbf{e}_1, \quad (5.4b)$$

wobei die Relation (3.3) zur Berechnung von $\mathbf{v}^{(2)}$ verwendet wird. Das Kreuzprodukt in Gleichung (5.4b) kann zu

$$\boldsymbol{\Sigma}_0(t_1) \mathbf{e}_1 \times \boldsymbol{\Sigma}_0(t_2) \mathbf{e}_1 = s \begin{pmatrix} sc (\sin(\omega_0 t_2) - \sin(\omega_0 t_1) + \sin(\omega_0 (t_1 - t_2))) \\ c (\cos(\omega_0 t_1) - \cos(\omega_0 t_2)) \\ s^2 \sin(\omega_0 (t_2 - t_1) - sc (\sin(\omega_0 t_1) - \sin(\omega_0 t_2))) \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

berechnet werden. Also gilt die Proportionalität

$$\mathbf{v}^{(2)} \propto s = \sin(\alpha). \quad (5.6)$$

Daraus folgt unmittelbar, dass für $\alpha = 0$ die zweite Ordnung verschwindet.

5.2 Berechnung der Korrelationen

Der zeitabhängige Operator $\mathbf{s}(t)$ hat die Form

$$\mathbf{s}(t) = U_D^\dagger(t) \boldsymbol{\sigma} U_D(t) \quad (5.7a)$$

Der Ausdruck kann mit der verwendeten Darstellung von $U_D(t)$ und Formel (3.6b) zu

$$\mathbf{s}(t) = \left[\cos(v(t)) \boldsymbol{\sigma} + (1 - \cos(v(t))) \frac{(\mathbf{v}(t) \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{v}(t)}{(v(t))^2} - \sin(v(t)) \frac{\mathbf{v}(t) \times \boldsymbol{\sigma}}{v(t)} \right] \quad (5.7b)$$

umgeformt werden. Die Matrix $\mathbf{F}(t)$ kann mit den Komponenten $s_i(t)$ berechnet werden. Dabei gilt

$$F_{ij}(t) = \overline{\langle s_i(t) \sigma_j \rangle}. \quad (5.8a)$$

Durch Ausnutzung der Beziehung $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \delta_{ij}$ kann die Formel

$$F_{ij}(t) = \overline{\cos(v(t)) \delta_{ij} + (1 - \cos(v(t))) \frac{v_i(t) v_j(t)}{(v(t))^2} + \sin(v(t)) \frac{\sum_k \epsilon_{ijk} v_k(t)}{v(t)}} \quad (5.8b)$$

bestimmt werden. Zur Bestimmung der Korrelationsmatrix müssen also die Mittelungen

$$I_0 = \overline{\cos(v)} \quad (5.9a)$$

$$I_{ij} = \overline{\frac{1 - \cos(v)}{v^2} v_i v_j + \sin(v(t)) \frac{\sum_k \epsilon_{ijk} v_k(t)}{v(t)}} \quad (5.9b)$$

bestimmt werden. Im Allgemeinen sind die benötigten Integrationen relativ aufwändig. Denn der Vektor $\mathbf{v}$ setzt sich aus Produkten der Fluktuation $\eta(t)$ zusammen. Daher wird eine Berechnung über Pfadintegrale nötig, wie in Kapitel 3.2 kurz beschrieben. Um diese Rechnungen zu vermeiden, soll der Vektor $\mathbf{v}$ in linearer Ordnung in der Kopplungsstärke κ entwickelt werden.

Für eine Analyse des resultierenden Fehlers durch die Näherung von $\mathbf{v}$ wird die Reihendarstellung von F_{ij} bestimmt. Hierbei gilt

$$F_{ij}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} v^{2n} \left(\delta_{ij} + \frac{v_i v_j}{(2n+2)(2n+1)} + \sum_k \epsilon_{ijk} \frac{v_k}{2n+1} \right). \quad (5.10)$$

Aus dieser Darstellung kann unmittelbar geschlossen werden, dass die Diagonalelemente F_{ii} in der ersten Ordnung von $\mathbf{v}$ bis zur Ordnung κ^4 korrekt dargestellt werden. Die Nichtdiagonalelemente weisen einen Fehler von κ^2 auf. Diese niedrigere Ordnung wird durch den letzten Summand erzeugt. Für $i = j$ verschwindet er, weshalb nur die Nebendiagonalelemente betroffen sind. Da der Mittelwert $\bar{\mathbf{v}}$ in der linearen Ordnung verschwindet, folgt damit für die Matrixelemente F_{ij}

$$F_{ij}(t) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} v^{2n} \left(\delta_{ij} + \frac{v_i v_j}{(2n+2)(2n+1)} \right) \quad (5.11a)$$

$$\approx \overline{\cos(v(t))} \delta_{ij} + (1 - \overline{\cos(v(t))}) \frac{v_i(t) v_j(t)}{(v(t))^2} \quad (5.11b)$$

Also ist die Matrix $\mathbf{F}$ in der ersten Ordnung der Magnus-Entwicklung symmetrisch, in höheren Ordnungen geht diese Eigenschaft verloren. Dieser Unterschied wird in der numerischen Berechnung in Kapitel 6 erkennbar.

5.3 Eigenschaften der effektiven Fluktuationen

Um das Verhalten der klassischen Fluktuationen zu berücksichtigen, werden die berechneten Größen bezüglich einer entsprechenden Verteilungsfunktion gemittelt. Diese Rechnungen können vereinfacht werden, indem statt der bisherigen Fluktuationen $\eta(t)$ die effektive Fluktuation $\mathbf{v}(t)$ in linearer Ordnung von κ genutzt wird. Dabei gilt gemäß Gleichung (5.4a)

$$\mathbf{v}(t) = \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \boldsymbol{\Sigma}_0(t_1) \mathbf{e}_1 \quad (5.12)$$

Nach dieser Beziehung ist $\mathbf{v}(t)$ eine Linearkombination aus gaußverteilten Zufallszahlen $\eta(t)$, womit auch $\mathbf{v}(t)$ gaußverteilt ist. Daher müssen die ersten beide Momente bekannt sein, um die Verteilungsfunktion $P(\mathbf{v})$ angeben zu können.

Der Mittelwert von $\mathbf{v}(t)$ verschwindet wegen

$$\overline{\mathbf{v}(t)} = \kappa \int_0^t dt_1 \underbrace{\overline{\eta(t_1)}}_0 \boldsymbol{\Sigma}_0(t_1) \mathbf{e}_1 = 0 \quad (5.13)$$

für alle Komponenten. Die entsprechenden Korrelationen werden in der Korrelationsmatrix $\mathbf{M}(t)$ zusammen gefasst. Diese ist durch

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \overline{v_i(t)v_j(t)} = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} \Sigma_{1i}(t_1) \Sigma_{1j}(t_2) \\ &= \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \Sigma_{1i}(t_1) \Sigma_{1j}(t_2) \end{aligned} \quad (5.14)$$

gegeben. Für die explizite Berechnung der Komponenten muss die Autokorrelationsfunktion $g(t)$ der ursprünglichen Zufallsvariablen $\eta(t)$ bekannt sein.

Die Matricelemente können durch Ausnutzung der Form von $\Sigma_1(t)$ umgeformt werden. Dabei treten folgende Hilfsintegrale

$$G(t) := \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \quad (5.15a)$$

$$h_1(t) := \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \cos[\omega(t_1 + t_2)] \quad (5.15b)$$

$$h_2(t) := \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \cos[\omega(t_1 - t_2)] \quad (5.15c)$$

$$h_3(t) := \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \cos(\omega t_1) \quad (5.15d)$$

häufig auf. Bei der Berechnungen scheinen zunächst sechs Typen von Integralen aufzutreten, allerdings werden wegen Relationen zwischen diesen nur die vier angegeben benötigt. Näheres hierzu wird im Appendix D.1 beschrieben. Für eine explizite Berechnung muss die Autokorrelationsfunktion $g(t)$ bekannt sein. Die Hilfsintegrale sind für eine exponentiell zerfallenden Funktion $g(t) = e^{-\Omega|t|}$ im Appendix D.2 angegeben.

Durch wenige Umformungen und Ausnutzung von Additionstheoremen der trigonometrischen Funktionen folgt für die Elemente der Kovarianzmatrix

$$M_{11}(t) = c^4 G(t) + 2s^2 c^2 h_3(t) + \frac{s^4}{2} (h_1(t) + h_2(t)) \quad (5.16a)$$

$$M_{22}(t) = \frac{s^2}{2} (h_2(t) - h_1(t)) \quad (5.16b)$$

$$M_{33}(t) = s^2 c^2 \left(G(t) - 2h_3(t) + \frac{1}{2} (h_1(t) + h_2(t)) \right) \quad (5.16c)$$

$$M_{12}(t) = s \left(\frac{s^2}{2} h_1(t) \tan(\omega_0 t) + c^2 h_3(t) \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) \right) = M_{21}(t) \quad (5.16d)$$

$$M_{13}(t) = sc \left(c^2 (h_3(t) - G(t)) + s^2 \left(\frac{1}{2} (h_1(t) + h_2(t)) - h_3(t) \right) \right) = M_{31}(t) \quad (5.16e)$$

$$M_{23}(t) = s^2 c \left(\frac{1}{2} h_1(t) \tan(\omega_0 t) - h_3(t) \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) \right) = M_{32}(t) \quad (5.16f)$$

Mit der so bestimmten Kovarianzmatrix $\mathbf{M}(t)$ kann die Verteilungsfunktion von $\mathbf{v}(t)$ angegeben werden. Mit der Determinante $|\mathbf{M}|$ hat sie die Form

$$P(\mathbf{v}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{v}\right), \quad (5.17)$$

wie in Kapitel 3.2.1 vorgestellt. Durch diese Verteilungsfunktion sind die Fluktuationen $\mathbf{v}(t)$ vollständig charakterisiert. Damit kann also der Einfluss auf die Korrelationen beschrieben werden.

Einige Eigenschaften der Kovarianzmatrix $\mathbf{M}$ sind für folgende Rechnungen wichtig. Die Eigenwerte und Eigenvektoren werden für die Diagonalisierung benötigt. Die Determinante und die Spur können verwendet werden, um die Eigenwerte zu berechnen. Daher werden diese Größen nun bestimmt.

Als erstes soll die Spur berechnet werden. Diese Größe ist deshalb nützlich, da die Summe der Eigenwerte von $\mathbf{M}$ gerade die Spur ist, was leicht durch eine Diagonalisierung zu zeigen ist. Für den hier vorgestellten Fall gilt für die Spur tr der Matrix $\mathbf{M}$

$$tr = \text{Tr}\{\mathbf{M}\} = c^2 G + s^2 h_2. \quad (5.18)$$

Die Determinante einer Matrix ist das Produkt der Eigenwerte, was auch leicht in der Diagonalbasis gezeigt werden kann. Die Determinante det kann zum Beispiel mit dem Laplaceschen Entwicklungssatz berechnet werden. Die Rechnung ergibt

$$det = \frac{c^2 s^4}{4} \left[G \left(h_2^2 - \frac{h_1^2}{\cos(\omega t)} \right) - 2 \left(h_2 - \frac{h_1}{\cos(\omega t)} \right) h_3^2 \right]. \quad (5.19)$$

Für die gegebene Matrix $\mathbf{M}$ können der Eigenvektor $\boldsymbol{\mu}_1$ und der zugehörige Eigenwert λ_1

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \begin{pmatrix} s \sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) \\ -\cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) \\ c \sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) \end{pmatrix} \quad (5.20a)$$

$$\lambda_1 = \frac{s^2}{2} \left(h_2 - \frac{h_1}{\cos(\omega t)} \right) \quad (5.20b)$$

geraten und dann verifiziert werden. Nun wird ausgenutzt, dass die Spur die Summe und die Determinante das Produkt der Eigenwerte sind. Dann gilt für die beiden übrigen Eigenwerte

$$\lambda_{2/3} = \frac{tr - \lambda_1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(tr - \lambda_1)^2 - 4 \frac{det}{\lambda_1}}. \quad (5.21a)$$

Durch Einsetzen der Spur und Determinante und einiger Rechnung folgt

$$\begin{aligned} \lambda_{2/3} = & \frac{1}{2} \left(c^2 G + s^2 \left(\frac{h_2}{2} + \frac{h_1}{2 \cos(\omega t)} \right) \right) \\ & \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(c^2 G - s^2 \left(\frac{h_2}{2} + \frac{h_1}{2 \cos(\omega t)} \right) \right)^2 + 4 s^2 c^2 \left(\frac{h_3}{\cos\left(\frac{\omega}{2}t\right)} \right)^2}. \end{aligned} \quad (5.21b)$$

Zur Berechnung der beiden übrigen Eigenwerte werden die Relationen

$$\boldsymbol{\mu}_i^T \boldsymbol{\mu}_j = \delta_{ij} \quad (5.22a)$$

$$(\mathbf{M} - \lambda_i \mathbf{1}) \boldsymbol{\mu}_i = 0 \quad (5.22b)$$

ausgenutzt. Denn mit dem bekannten Vektor $\boldsymbol{\mu}_1$ kann Gleichung (5.22a) ausgenutzt werden, um eine Beziehung zwischen den zweiten Elementen der Vektoren $\boldsymbol{\mu}_{2/3}$ und den ersten und dritten Elementen herzustellen. Mit der ersten Zeile aus der Gleichung (5.22b) kann dann für die Eigenvektoren

$$\boldsymbol{\mu}_{2/3} = \mathcal{N}_{2/3} \begin{pmatrix} 1 \\ (s + cA_{2/3}) \tan\left(\frac{\omega_0}{2}t\right) \\ A_{2/3} \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

mit der Normierungskonstante $\mathcal{N}_{2/3}$ berechnet werden. Hierbei wird die Abkürzung

$$A_{2/3} = \frac{(M_{11} - \lambda_{2/3}) \cos\left(\frac{\omega_0}{2}t\right) + M_{12}s \sin\left(\frac{\omega_0}{2}t\right)}{M_{13} \cos\left(\frac{\omega_0}{2}t\right) + M_{12}c \sin\left(\frac{\omega_0}{2}t\right)} \quad (5.24)$$

verwendet.

5.4 Berechnung der Mittelungen

Die Berechnung der Korrelationen benötigen in der ersten Ordnung von $\mathbf{v}$ zwei Typen von Mittelungsintegralen

$$I_0 = \int_{\mathbb{R}^3} \cos(v) P(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (5.25a)$$

$$I_{ij} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1 - \cos(v)}{v^2} v_i v_j P(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (5.25b)$$

Für eine spätere Analyse wird die Relation

$$I_0 + \sum_i I_{ii} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\cos(v) + \frac{1 - \cos(v)}{v^2} \sum_{i=1}^3 v_i^2 \right) P(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \int_{\mathbb{R}^3} P(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1 \quad (5.26)$$

genutzt.

Zur Berechnung sollen zwei Methoden verwendet werden. Zum ersten kann in die Diagonalbasis von $\mathbf{M}(t)$ gedreht werden. Hier ist die Berechnung einer Reihendarstellung der Integrale möglich. Zum zweiten kann in Kugelkoordinaten gerechnet werden. Dann kann über den Betrag v der Fluktuation analytisch integriert werden. Die beiden Methoden sind für verschiedene Fälle effizient, was in Abschnitt 5.4.3 dargestellt wird.

5.4.1 Berechnung in Diagonalbasis

Durch eine geeignete Koordinatentransformation kann die Matrix $\mathbf{M}(t)$ diagonalisiert werden. Dafür wird die Drehmatrix $\mathbf{R}$ verwendet. Damit folgt für die Diagonalmatrix $\mathbf{D}(t)$

$$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{R}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{R}^T \quad (5.27)$$

Die Einträge der Diagonalmatrix $\mathbf{D}^{-1}$ sind die Inversen der Eigenwerte λ_i der Matrix. Die Rotation $\mathbf{R}$ setzt sich aus den entsprechenden Eigenvektoren $\boldsymbol{\mu}_i$ in den Spalten zusammen. Für den Vektor $\mathbf{r}$ in der Diagonalbasis gilt die Relation

$$\mathbf{v} = \mathbf{R}\mathbf{r} \quad (5.28)$$

Unter Rotationen sind Beträge invariant, also gilt explizit der Zusammenhang

$$v = r \quad (5.29)$$

Für das benötigte Differential $d\mathbf{r}$ kann ausgenutzt werden, dass die Rotation $\mathbf{R}$ die Jacobi-Matrix ist und die Determinante einer orthogonalen Matrix 1 ist. Also gilt

$$d\mathbf{v} = |\mathbf{R}| d\mathbf{r} = d\mathbf{r}. \quad (5.30)$$

In den benötigten Integrale I_0 und I_{ij} treten daher keine weiteren Terme durch die Substitution auf. Für die Komponenten v_i kann Gleichung (5.28) genutzt werden. Explizit gilt also

$$v_i = \sum_j R_{ij} r_j \quad (5.31)$$

Durch Einsetzen der Transformation in die Verteilungsfunktion kann der Zusammenhang

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{r}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{r}\right) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda_i}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2\lambda_i}\right) = \prod_i P(r_i) \quad (5.32)$$

gefunden werden. Der große Vorteil dieser Darstellung ist, dass die Exponentialfunktion faktorisiert.

Im Integral I_0 tritt als Funktion neben der Verteilungsfunktion nur der Kosinus auf. Dieser kann mit (5.29) direkt transformiert werden.

Für die Integrale I_{ij} liefert Einsetzen der Transformation

$$I_{ij} = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \frac{1 - \cos(r)}{r^2} \sum_{n,m} R_{in} r_n R_{jm} r_m P(\mathbf{r}) \quad (5.33a)$$

$$= \sum_{n,m} R_{in} R_{jm} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \frac{1 - \cos(r)}{r^2} r_n r_m P(\mathbf{r}) \quad (5.33b)$$

$$= \sum_{n,m} R_{in} R_{jm} \tilde{I}_{nm}, \quad (5.33c)$$

wobei die Definition

$$\tilde{I}_{nm} := \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} \frac{1 - \cos(r)}{r^2} r_n r_m P(\mathbf{r}) \quad (5.34)$$

verwendet wird.

Zur Berechnung der Korrelationen müssen also die neuen Integrale $\tilde{I}_{ij}$ berechnet werden. Wegen der einfachen Verteilungsfunktion $P(\mathbf{r})$ gilt aber

$$\tilde{I}_{nm} = -\tilde{I}_{nm} = 0 \quad \text{für } n \neq m \quad (5.35)$$

Dies kann durch die Koordinatentransformation $r_n \rightarrow -r_n$ direkt abgelesen werden. Daher müssen nur die vier Integrale

$$I_0 = \int_{\mathbb{R}^3} \cos(r) P(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (5.36a)$$

$$\tilde{I}_{ii} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1 - \cos(r)}{r^2} r_i^2 P(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (5.36b)$$

berechnet werden. Für diese Integrale gilt analog zu Gleichung (5.26) die Beziehung

$$I_0 + \sum_{i=1}^3 \tilde{I}_{ii} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\cos(r) + \sum_{i=1}^3 \frac{1 - \cos(r)}{r^2} r_i^2 \right) P(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1, \quad (5.37)$$

welche für den Vergleich der Methoden genutzt wird. Durch Einsetzen der Taylorreihe der Kosinusfunktion können die Integrale in der Diagonalbasis analytisch berechnet werden. Explizit gilt

$$I_0 = \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} r^{2n} P(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \int_{\mathbb{R}^3} (r_1^2 + r_2^2 + r_3^2)^n P(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5.38a)$$

Zur Zerlegung des Ausdruckes $(r_1^2 + r_2^2 + r_3^2)^n$ wird die Multinomialtheorem genutzt, womit folgt

$$I_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \int_{\mathbb{R}^3} \sum_{k_1+k_2+k_3=n} \frac{n!}{k_1!k_2!k_3!} r_1^{2k_1} r_2^{2k_2} r_3^{2k_3} P(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5.38b)$$

Die Verteilungsfunktionen $P(\mathbf{r})$ faktorisiert ebenfalls. Damit ergibt sich weiter

$$I_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \sum_{k_1+k_2+k_3=n} \prod_{j=1}^3 \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{k_j!} r_j^{2k_j} P(r_j) dr_j \quad (5.38c)$$

Das verbliebene Integrale kann durch partielle Integration gelöst werden, was im Appendix in Gleichung (A.9c) berechnet wird. Schließlich erhält man

$$I_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \sum_{k_1+k_2+k_3=n} \prod_{j=1}^3 \frac{(2k_j-1)!!}{k_j!} \chi_j^{k_j} \quad (5.38d)$$

$$(5.38e)$$

Damit können die Abkürzungen

$$a_n \equiv \frac{(-1)^n n!}{(2n)!} \quad (5.39a)$$

$$I(\{k_j\}, \{\lambda_j(t)\}) \equiv \prod_{j=1}^3 \frac{(2k_j - 1)!!}{k_j!} \lambda_j^{k_j} \quad (5.39b)$$

definiert werden, um I_0 effizient zu berechnen. Die Rechnung für die Integrale $\tilde{I}_{ii}$ sind analog zu diesen Schritten. Die Differenz sorgt dafür, dass die Summe über n verschoben wird. Insgesamt können so die Integrale in die kompakte Form

$$I_0 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sum_{k_1+k_2+k_3=n} I(\{k_j\}, \{\lambda_j(t)\}) \quad (5.40a)$$

$$\tilde{I}_{ii} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-a_{n+1}}{n+1} \sum_{k_1+k_2+k_3=n} I(\{k_j\}, \{\lambda_j(t)\}) (2k_i + 1) \lambda_i, \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (5.40b)$$

gebracht werden. Die Ausdrücke müssen bei numerischer Auswertung bei einer gewählten Ordnung abgebrochen werden.

5.4.2 Berechnung in Kugelkoordinaten

Für die Berechnung in Kugelkoordinaten wird zuerst die Verteilungsfunktion betrachtet. Hierfür wird die sphärische Funktion

$$\Phi(\vartheta, \varphi) = \frac{\mathbf{v}^T}{v} \mathbf{M}^{-1} \frac{\mathbf{v}}{v} = \frac{\mathbf{v}^T}{v} \frac{\mathbf{W}}{|\mathbf{M}|} \frac{\mathbf{v}}{v} \quad (5.41)$$

definiert. Mit dieser und Gleichung (5.17) folgt

$$P(v, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \Phi(\vartheta, \varphi) v^2\right) \quad (5.42)$$

Zur Berechnung muss die inverse Matrix $\mathbf{W} = |\mathbf{M}| \mathbf{M}^{-1}$ bekannt sein. Diese kann aus der Matrix $\mathbf{M}$ mit der Relation

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} M_{22}M_{33} - M_{23}^2 & M_{13}M_{23} - M_{12}M_{33} & M_{12}M_{23} - M_{13}M_{22} \\ M_{13}M_{23} - M_{12}M_{33} & M_{11}M_{33} - M_{13}^2 & M_{12}M_{13} - M_{23}M_{11} \\ M_{12}M_{23} - M_{13}M_{22} & M_{12}M_{13} - M_{23}M_{11} & M_{11}M_{22} - M_{12}^2 \end{pmatrix} \quad (5.43)$$

bestimmt werden. Mit den Abkürzungen

$$A_{\pm} = h_2 \pm h_1 \quad (5.44a)$$

$$B_{\pm} = h_2 \pm \frac{h_1}{\cos(\omega t)} \quad (5.44b)$$

gilt für die sechs Komponenten der Matrix $\mathbf{W}$

$$W_{11} = \frac{s^4 c^2}{4} (2GA_- + B_+ B_- - 4h_3 B_- - 4h_5^2) \quad (5.45a)$$

$$W_{22} = \frac{s^2 c^2}{2} (GA_+ - 2h_3^2) \quad (5.45b)$$

$$W_{33} = \frac{s^2 c^4}{2} (GA_- - 2h_5^2) + s^4 c^2 h_3 B_- + \frac{s^6}{4} B_+ B_- \quad (5.45c)$$

$$W_{12} = \frac{s^3 c^2}{2} \left(Gh_1 \tan(\omega_0 t) + h_3(t) \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) (B_- - 2h_3) \right) = W_{21} \quad (5.45d)$$

$$W_{13} = \frac{s^3 c^3}{2} (h_3 B_- + 2h_5^2 - GA_-) + \frac{s^5 c}{4} (B_+ B_- - 2h_3 B_-) = W_{31} \quad (5.45e)$$

$$W_{23} = \frac{s^2 c^3}{2} \left(Gh_1 \tan(\omega_0 t) - 2h_3^2 \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) \right) - \frac{s^4 c}{2} h_3(t) \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) B_- = W_{32} \quad (5.45f)$$

Neben der Transformation der Verteilungsfunktion muss auch das Differential geeignet substituiert werden. In Kugelkoordinaten gilt

$$d\mathbf{v} = v^2 dv \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi \quad (5.46)$$

An dieser Stelle kann der Vorteil der sphärischen Darstellung ausgenutzt werden. Die Integration über den Betrag v kann analytisch durchgeführt werden. Dafür werden die Größen $P_1(\vartheta, \varphi)$ und $P_2(\vartheta, \varphi)$

$$P_1(\vartheta, \varphi) = \int_0^\infty dv v^2 P(v, \vartheta, \varphi) \quad (5.47a)$$

$$P_2(\vartheta, \varphi) = \int_0^\infty dv v^2 \cos(\kappa v) P(v, \vartheta, \varphi) \quad (5.47b)$$

benötigt. Der Faktor v^2 stammt aus der Jacobi-Determinante. Die Berechnungen werden im Folgenden kurz skizziert. Für $P_1(\vartheta, \varphi)$ gilt

$$P_1(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \int_0^\infty dv v^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \Phi(\vartheta, \varphi) v^2\right) \quad (5.48a)$$

Durch partielle Integration kann dies leicht zu

$$P_1(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \frac{1}{\Phi(\vartheta, \varphi)} \int_0^\infty dv \exp\left(-\frac{1}{2} \Phi(\vartheta, \varphi) v^2\right) \quad (5.48b)$$

umgeformt werden. Die verbliebene Integration ist ein Gaußintegral. Es folgt

$$P_1(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi \sqrt{|\mathbf{M}|}} \frac{1}{\sqrt{\Phi(\vartheta, \varphi)}^3} \quad (5.48c)$$

Die Rechnungen für $P_2(\theta, \varphi)$ sind aufwändiger. Hier kann zunächst durch partielle Integration die Umformung

$$P_2(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3 \sqrt{|\mathbf{M}|}} \frac{\Phi(\vartheta, \varphi) - \kappa^2}{\Phi(\vartheta, \varphi)^2} \int_0^\infty dv \cos(\kappa v) \exp\left(-\frac{1}{2}\Phi(\vartheta, \varphi)v^2\right) \quad (5.49a)$$

gefunden werden. Die verbliebene Integration wird im Anhang beschrieben. Mit Gleichung (A.8d) erhält man das Ergebnis

$$P_2(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi \sqrt{|\mathbf{M}|}} \frac{\Phi(\vartheta, \varphi) - \kappa^2}{\sqrt{\Phi(\vartheta, \varphi)^5}} \exp\left(-\frac{\kappa^2}{2\Phi(\vartheta, \varphi)}\right) \quad (5.49b)$$

bestimmt werden.

Mit diesen Größen können die gesuchten Integrale I_0 und I_{ij} berechnet werden. Dafür muss noch über die Kugeloberfläche S integriert werden. Der genaue Zusammenhang lautet

$$I_0 = \int_S P_2(\theta, \varphi) d\Omega \quad (5.50a)$$

$$I_{ij} = \int_S \frac{v_i v_j}{v^2} (P_1(\theta, \varphi) - P_2(\theta, \varphi)) d\Omega, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}. \quad (5.50b)$$

Diese verbliebenen Integrationen werden numerisch ausgeführt.

5.4.3 Unterschiede zwischen den Methoden

Die beiden vorgestellten Methoden werden unter unterschiedlichen Bedingungen genutzt. Die Fehler in den beiden Methoden können direkt an den Beziehungen

$$I_0 + \sum_i I_{ii} - 1 = 0 \quad (5.51a)$$

$$I_0 + \sum_i \tilde{I}_{ii} - 1 = 0 \quad (5.51b)$$

aus den Gleichungen (5.26) und (5.37) abgelesen werden. Die Relationen sind analytisch berechenbar, jede Abweichung in der Numerik erlaubt also die Genauigkeit abzuschätzen. Die beiden Methoden zeigen für verschiedene Zeiten große Fehler in dieser Gleichung.

Die Berechnung über sphärische Koordinaten ist numerisch für kleine Zeiten ungenau. Grund hierfür ist die Determinante der Matrix $\mathbf{M}$, welche sehr langsam von Null aus im entsprechenden Zeitbereich ansteigt. Dadurch sind die Integranden in (5.50a) und (5.50b) numerisch ungenau.

Die Integration in Diagonalebasis kann analytisch durchgeführt werden, wodurch die Determinante in der Berechnung nicht benötigt wird. Somit können die Integrale für kleine Zeiten berechnet werden. Der Nachteil an der Berechnung über Reihen ist der steigende numerische Aufwand. Für große Zeiten müssen immer mehr Reihenglieder

berücksichtigt werden. Durch den Abbruch der Reihe treten für große Eigenwerte $\lambda_i(t)$ gravierende Ungenauigkeiten auf.

In Abbildung 5.1 sind die absoluten Abweichungen von den Gleichungen (5.51a) und (5.51b) für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ dargestellt. Damit können die obigen Überlegungen bestätigt werden. Da die Eigenwerte $\lambda_i(t)$ für die gewählten Parameter und im betrachteten Zeitbereich relativ klein sind, zeigt die Berechnung über die Reihen keinen großen Fehler. Für eine erhöhte Kopplung $\kappa = 0.5\omega_0$ ändert sich dies allerdings. In Abbildung 5.2 sind ebenfalls die absoluten Abweichungen aufgetragen. Hier kann deutlich erkannt werden, dass der Fehler in der Reihen-Berechnung sehr stark ansteigt. Die Methode der numerischen Integration zeigt hingegen keinen Anstieg im Fehler, also ist sie in diesem Fall besser geeignet.

Die Abbildungen zeigen, dass je nach gewählten Parametern und betrachtetem Zeitbereich eine der Methoden besser geeignet ist. Im Folgenden wird immer die genauere Methode zur Berechnung verwendet.

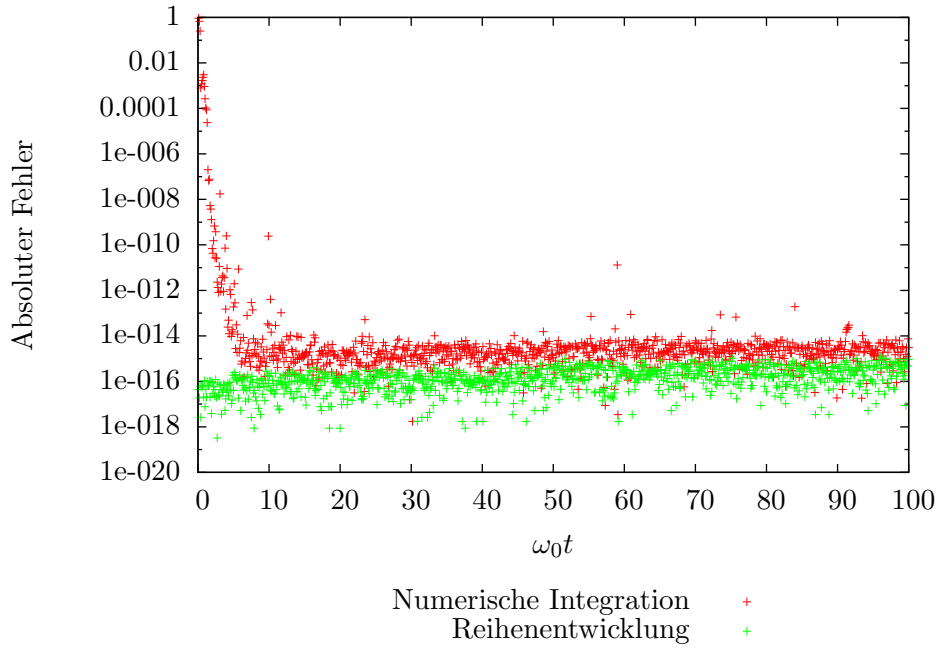


Abbildung 5.1: Absoluter Fehler in den Gleichungen (5.51a) und (5.51b) für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$.

5.5 Spezialfälle

Die bisherigen Rechnungen in der Magnus-Entwicklung gehen von einem Neigungswinkel der Rotationsachse mit $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2})$ und einer exponentiell zerfallenden Korrelationsfunktion $g(t) = e^{-\Omega|t|}$ aus. Die Besonderheiten für die Fälle $\alpha = 0$, $\alpha = 1/2\pi$ und $\Omega = 0$

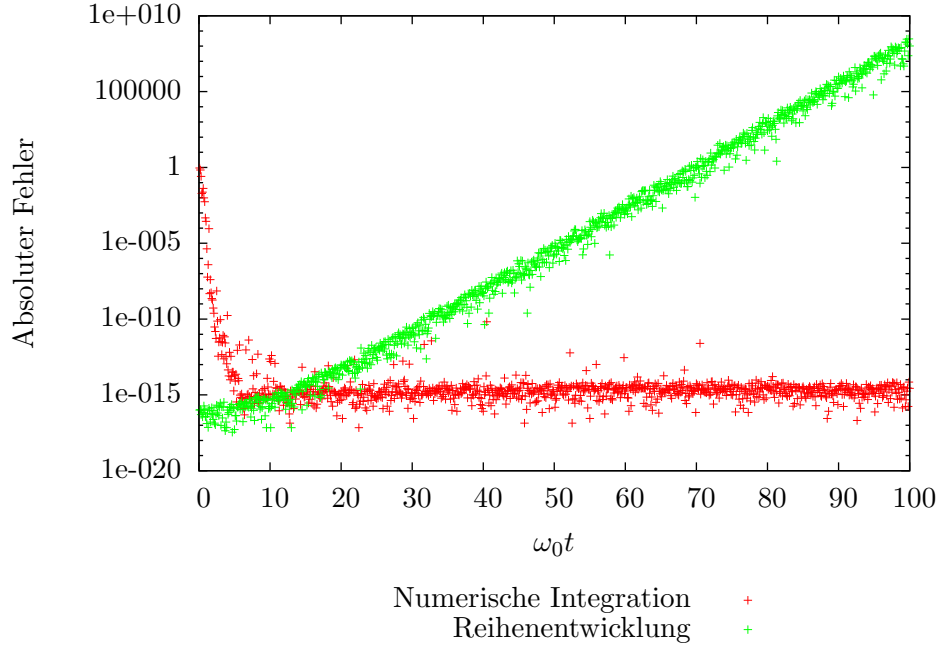


Abbildung 5.2: Absoluter Fehler in den Gleichungen (5.51a) und (5.51b) für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung $\kappa = 0.5\omega_0$.

werden kurz beschrieben.

5.5.1 Transversales Feld

Wenn $\alpha = 0$ gewählt wird, folgt für die erste Zeile der Rotationsmatrix

$$\mathbf{e}_1^T \boldsymbol{\Sigma} = (1 \quad 0 \quad 0) \quad (5.52)$$

Daher wird für weitere Rechnungen nur eine effektive Fluktuation v benötigt, die durch

$$v = \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \quad (5.53)$$

gegeben ist. Für die Berechnung der Matrix $\mathbf{F}$ kann weiterhin Formel (5.11a) genutzt werden, sie vereinfacht sich aber stark. Nur die Komponente v_1 ist endlich. Damit verschwinden alle Matrixelemente F_{ij} mit $i \neq j$. Die endlichen Matrixelemente F_{ii} sind

$$F_{ii} = \overline{\cos(v)} + \overline{(1 - \cos(v))} \delta_{i1} \quad (5.54)$$

Die verbliebene Mittelung I_0 kann analytisch durchgeführt werden, da nicht über den Vektor $\mathbf{v}$ integriert wird. Explizit gilt

$$I_0 = \exp\left(-\frac{G}{2}\right) \quad (5.55)$$

Dieses Ergebnis entspricht dem aus der direkten Berechnung in Kapitel 4.2.2. Da der Hamiltonoperator $H_{1,D}(t)$ zu verschiedenen Zeiten für $\alpha = 0$ kommutiert, müssen die Ergebnisse auch übereinstimmen. Denn die erste Ordnung der Magnus-Entwicklung ist das exakte Ergebnis. Die Berechnung im Wechselwirkungsbild liefert die mögliche Zerlegung in Gleichung (4.18) auf eine andere Weise, indem vor der Berechnung der freie und der gekoppelte Teil des Hamiltonoperators getrennt werden.

5.5.2 Longitudinales Feld

Für den Fall $\alpha = \pi/2$ hat die erste Zeile der Rotationsmatrix die Form

$$\mathbf{e}_1^T \Sigma = (\cos(\omega_0 t) \quad \sin(\omega_0 t) \quad 0) \quad (5.56)$$

Also werden zwei effektive Fluktuationen $v_{\pi/2,1}$ und $v_{\pi/2,2}$ benötigt, die durch den zweidimensionalen Vektor

$$\mathbf{v}_{\pi/2} = \kappa \int_0^t dt_1 \eta(t_1) \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t) \\ \sin(\omega_0 t) \end{pmatrix} \quad (5.57)$$

gegeben sind. Damit ergibt sich die Korrelationsmatrix $\mathbf{M}_{\pi/2}$ zu

$$\mathbf{M}_{\pi/2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} h_1 + h_2 & h_4 \\ h_4 & h_2 - h_1 \end{pmatrix}. \quad (5.58)$$

Für den Winkel $\alpha = 1/2\pi$ und der ersten Ordnung der Magnus-Entwicklung in κ ist die Korrelationsmatrix $\mathbf{M}_{\pi/2} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, während im allgemeinen Fall $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ gilt. Die entsprechende Verteilungsfunktion $P(\mathbf{v}_{\pi/2})$ ist

$$P(\mathbf{v}_{\pi/2}) = \frac{1}{2\pi \sqrt{|\mathbf{M}|}} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{v}_{\pi/2}^T \mathbf{M}_{\pi/2}^{-1} \mathbf{v}_{\pi/2} \right). \quad (5.59)$$

Für die Formel (5.11a) muss nun berücksichtigt werden, dass die dritte Komponente v_3 verschwindet. Damit verschwinden in der ersten Ordnung in κ der Magnus-Entwicklung die Matrixelemente F_{13}, F_{23}, F_{31} und F_{32} . Der Vektor $\mathbf{v}^{(2)}$ der zweiten Ordnung in κ ist für $\alpha = 1/2\pi$

$$\mathbf{v}^{(2)} = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega_0(t_1 + t_2)) \end{pmatrix}. \quad (5.60)$$

Mit der Gleichung (5.8b) für F_{ij} folgt, dass die Matrixelemente F_{13}, F_{23}, F_{31} und F_{32} damit auch in zweiter Ordnung der Magnus-Entwicklung verschwinden. Für höhere Ordnungen gilt das selbe, da die zu mitteln Termen immer eine ungerade Potenz der Zufallsvariable $\eta(t)$ aufweist. Daher kann geschlossen werden, dass diese Matrixelemente für beliebige Ordnungen in κ verschwinden.

Die benötigten Integrale werden analog zum allgemeinen Fall berechnet. Allerdings

treten für beide Berechnungsmethoden einige Unterschiede auf. Die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{M}$ sind für $\alpha = \pi/2$

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \left(h_2 \pm \frac{h_1}{\cos(\omega_0 t)} \right) \quad (5.61)$$

Die zugehörigen Eigenvektoren sind

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\mu}_2 = \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (5.62)$$

Mit dem Eigensystem können die Integrale über die Reihendarstellung berechnet werden. Die entsprechenden Rechnungen sind völlig analog und liefern

$$I_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n n!}{(2n)!} \sum_{k_1+k_2=n} \prod_{j=1}^2 \frac{(2k_j-1)!!}{k_j!} \lambda_j^{k_j} \quad (5.63a)$$

$$\tilde{I}_{ii} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n n!}{(2n+2)!} \sum_{k_1+k_2=n} \prod_{j=1}^2 \frac{(2k_j-1)!!}{k_j!} \lambda_j^{k_j} (2k_i+1) \lambda_i \quad \text{für } i \in \{1,2\} \quad (5.63b)$$

Alternativ können die Integrale über eine Darstellung in Polarkoordinaten bestimmt werden. Prinzipiell ist diese Methode ähnlich zur Berechnung über sphärische Koordinaten. Allerdings gilt hier für die Differentiale

$$d\mathbf{v} = v dv d\varphi \quad (5.64)$$

Dies führt dazu, dass die Integration über den Betrag v nicht analytisch durchführbar ist. Denn das auftretende Integral

$$\int_0^{\infty} dv v \cos(v) P(v, \varphi) = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \int_0^{\infty} dv \sin(v) P(v, \varphi) \quad (5.65)$$

ist nicht analytisch lösbar. Die Methode bietet daher keinen Vorteil gegenüber eine direkten numerischen Berechnung der Ausgangsintegrale I_0 und I_{ij} .

5.5.3 Konstante Korrelationsfunktion

Als letzter Spezialfall wird eine konstante Korrelationsfunktion $g(t) = 1$ behandelt. Aus der konstanten Korrelationsfunktion folgt auch direkt eine zeitunabhängige Fluktuation η . Dann können die Korrelationen direkt berechnet werden, da der entsprechende Hamiltonoperator konstant in der Zeit ist (vergleiche Kapitel 4.3). Das Ergebnis für den betrachteten Fall ist also bekannt.

Allerdings kann auch die hier vorgestellte Methode der Magnus-Entwicklung verwendet werden. Der entsprechende Wechselwirkungsoperator $H_{1,D}(t)$ hat die Form

$$H_{1,D}(t) = \frac{\kappa}{2} \eta \boldsymbol{\Sigma}_1^T(t) \boldsymbol{\sigma} \quad (5.66)$$

Da er zeitabhängig ist und für zwei beliebige Zeiten t_1 und $t_2 \neq t_1 + 2\pi m$ mit $m \in \mathbb{Z}$ nicht vertauscht, kann der Zeitentwicklungsoperator $U_D(t)$ nicht analytisch berechnet werden. Daher soll die Magnus-Entwicklung in erster Ordnung genutzt werden, um eine Näherung zu bestimmen. Für den Vektor $\mathbf{v}(t)$ gilt damit

$$\mathbf{v}(t) = \kappa\eta \int_0^t dt_1 \boldsymbol{\Sigma}_1(t) = \frac{\kappa\eta}{\omega_0} \begin{pmatrix} c^2\omega_0 t + s^2 \sin(\omega_0 t) \\ -s \cos(\omega_0 t) \\ sc [\sin(\omega_0 t) - \omega_0 t] \end{pmatrix} \quad (5.67)$$

In Gleichung (5.11a) treten neben den Vektorelemente $v_i(t)$ auch der Betrag $v(t)$ auf. Das Quadrat kann leicht zu

$$v^2(t) = \frac{\eta^2 \kappa^2}{\omega_0^2} (c^2 \omega_0^2 t^2 + 2s^2 [1 - \cos(\omega_0 t)]) \quad (5.68)$$

berechnet werden. Mit dem Vektor $\mathbf{v}(t)$ und seinem Betrag $v(t)$ kann die Gleichung (5.11a) für alle Komponenten ausgewertet werden, wodurch die Korrelationsmatrix $\mathbf{C}$ bestimmt ist. Hierbei wird die nötige Mittelung bezüglich der Fluktuationen η stark vereinfacht. Nur die trigonometrischen Funktionen hängen von den Fluktuationen ab. Die nötigen Mittelungen treten in ähnlicher Form schon in Kapitel 4.2.1 auf. Für diesen Fall gilt

$$\overline{\cos(v)} = e^{-\frac{v^2}{2}} \quad (5.69a)$$

$$\overline{\sin(v)} = 0. \quad (5.69b)$$

Mit diesen Ergebnissen kann die Gleichung (5.11a) für F_{ij} zu

$$F_{ij} = e^{-\frac{v^2}{2}} \delta_{ij} + \left(1 - e^{-\frac{v^2}{2}}\right) \frac{v_i v_j}{v^2} \quad (5.70)$$

umgeschrieben werden. Anhand dieser Form werden nun einige Eigenschaften besprochen.

Für den Fall $\alpha < \pi/2$ wird die Exponentialfunktion für großen Zeiten gegen 0 konvergieren. Für $\alpha = \pi/2$ ist dies nicht der Fall, da v^2 dann eine zeitlich oszillierende Funktion ist. Weil die Vektorelemente von $\mathbf{v}$ ebenfalls oszillieren, werden alle endlichen Matrixelemente F_{ij} oszillieren, aber nicht gegen einen Grenzwert konvergieren. Daher soll sich die Behandlung auf die übrigen Winkel $\alpha \in [0, 1/2\pi)$ beschränken.

Für die Berechnung der Grenzwerte bei $t \rightarrow \infty$ kann die Exponentialfunktion auf 0 gesetzt werden, da die Zeit t des Systems als hinreichend groß angenommen werden kann. Also muss das Verhalten der Größe

$$F_{ij}|_{\omega_0 t \gg 1} \approx \frac{v_i v_j}{v^2} \quad (5.71)$$

untersucht werden. Im Zähler und Nenner dieser Größen treten neben trigonometrischen Funktionen auch Potenzen von t auf. Diese sind für den Grenzwert relevant, da

die trigonometrischen Funktionen eine Oszillation beschreiben. Da der Nenner entsprechend Gleichung (5.68) quadratisch in t ist, konvergieren die Matrixelemente $F_{12} = F_{21}$, F_{22} und $F_{23} = F_{32}$ gegen 0, da für diese Elemente der Zähler maximal linear in t ist und so den stärker steigenden Nenner nicht kompensiert. Für die übrigen Matrixelemente gilt

$$F_{11}|_{\omega_0 t \gg 1} \approx c^2 \quad (5.72a)$$

$$F_{33}|_{\omega_0 t \gg 1} \approx s^2 \quad (5.72b)$$

$$F_{13}|_{\omega_0 t \gg 1} = F_{31}|_{\omega_0 t \gg 1} \approx -sc \quad (5.72c)$$

da jeweils der Zähler ebenfalls quadratisch in t ist. Mit diesem Ergebnis und Gleichung (4.34) folgt für den Grenzwert der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ mit Gleichung (4.42c)

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.73)$$

Das Ergebnis hängt offensichtlich weder von der Kopplungsstärke κ noch vom Winkel α ab. Diese Eigenschaft unterscheidet die Ergebnisse der Näherung und der direkten Berechnung in Kapitel 4.3. Denn in den Abbildungen 4.8 und 4.9 ist klar erkennbar, dass sowohl der Winkel α als auch die Kopplung κ einen Einfluss auf die Korrelationsselemente haben. Dieser Unterschied zeigt, dass die Magnus-Entwicklung durch die Näherung eine falsche Dynamik beschreiben kann.

5.6 Spinkorrelationen in der Magnus-Entwicklung

Mit der vorgestellten Magnus-Entwicklung kann die effektive Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ der Spinoperatoren in ersten Ordnung von κ berechnet werden. Dabei hängen die Größen von den Systemparametern ab, im verwendeten Modell sind dies die Rotationsfrequenz ω_0 und der Winkel α des externen Feldes, die Kopplungsstärke κ zwischen dem Spin und seiner Umgebung und die Zeitkonstante Ω der Autokorrelationsfunktion $g(t) = e^{-\Omega|t_1-t_2|} = \overline{\eta(t_1)\eta(t_2)}$. Diese Arbeit beschränkt sich auf ausgewählte Beispiele bei der Wahl der Parameter, da eine Analyse der Parameterabhängigkeit nicht Ziel dieser Arbeit ist.

5.6.1 Untersuchte Korrelationen

Die Untersuchung in diesem Kapitel beschränken sich auf die Korrelationen P_{11} und P_{33} , was in diesem Abschnitt gerechtfertigt wird. Die Ergebnisse aus der Magnus-Entwicklung zeigen die Relationen

$$P_{31} \approx P_{13} \quad (5.74a)$$

$$P_{12} \approx -P_{21} \quad (5.74b)$$

$$P_{32} \approx -P_{23} \approx P_{33} \tan(\omega_0 t), \quad (5.74c)$$

weshalb die Untersuchung der Korrelationen P_{11} , P_{22} , P_{33} , P_{13} und P_{12} ausreichend ist. Für niedrige Kopplungen κ gilt zusätzlich

$$P_{22} \approx P_{33}, \quad (5.75)$$

so dass die Beschreibung auf P_{33} beschränkt werden kann, womit P_{22} näherungsweise erfasst wird.

Die Korrelationen P_{13}, P_{31} , P_{12} und P_{21} werden im Rest der Arbeit nicht mehr genauer behandelt, da sie mit der vorgestellten Methode über die Magnus-Entwicklung ungenau berechnet werden. Zur Untersuchung über die Qualität der Näherung wird an dieser Stelle ein Vergleich mit der analytischen Näherung für kleine Zeiten genutzt. Im Gegensatz dazu wird in Kapitel 7 die vorgestellte Magnus-Entwicklung mit einer numerischen Rechnung verglichen, wobei größere Zeiten betrachtet werden können.

Die Korrelationen werden für die Parameter $\Omega = 0.1\omega_0$, $\kappa = 0.1\omega_0$ und $\alpha = 1/4\pi$ in Abhängigkeit von der Zeit $\omega_0 t$ berechnet, womit die zeitliche Entwicklung der Abweichung bestimmt werden kann.

In Abbildung 5.3 ist die in der Magnus-Entwicklung berechnete Parallelkorrelation in Abhängigkeit von der Zeit $\omega_0 t$ dargestellt. Daneben ist auch die entsprechende analytische Näherungen aufgetragen, die durch Gleichung (4.41) gegeben ist. Die Abbildung zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Methoden.

Die Normalkorrelation P_{33} und die Kreuzkorrelation P_{32} sowie die entsprechenden

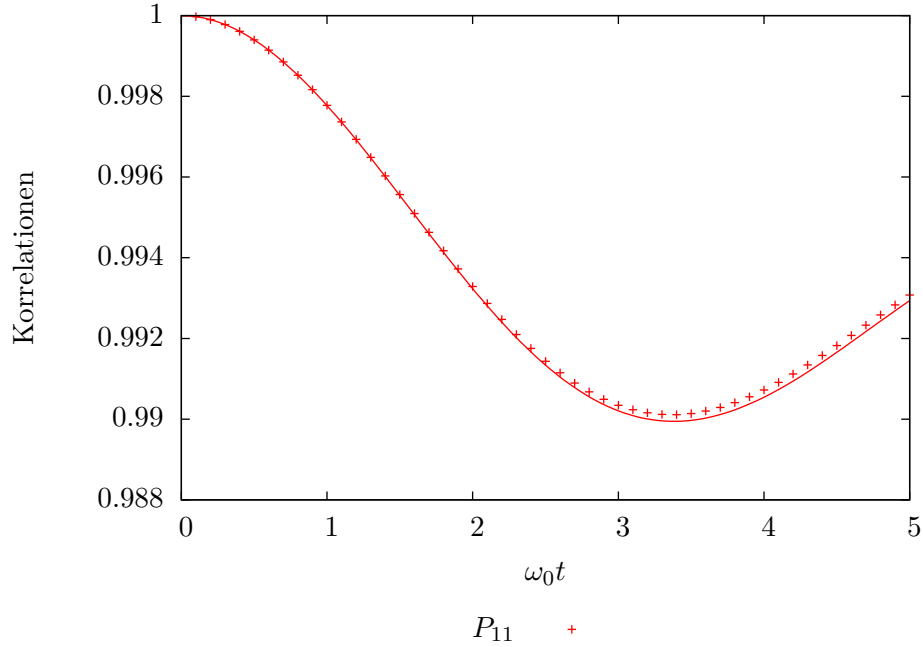


Abbildung 5.3: Vergleich der berechneten Korrelation P_{11} mit der Magnus-Entwicklung und der analytischen Näherung in Gleichung (4.41). Die Datenpunkt stammen aus den Rechnungen mit der Magnus-Entwicklung, die Kurve ist die analytische Näherung.

analytischen Näherungen aus Gleichung (4.41) sind in Abbildung 5.4 dargestellt. Qualitativ stimmen die Kurven sehr gut überein, die Kurven aus Magnus-Entwicklung und Näherung beschreiben also die selbe Dynamik. Die absolute Abweichung zwischen den Kurven scheint durch die Skalierung sehr klein zu sein, ist allerdings größer als die Abweichung für die Korrelation P_{11} , wie in Abbildung 5.6 erkennbar ist. Als letztes wer-

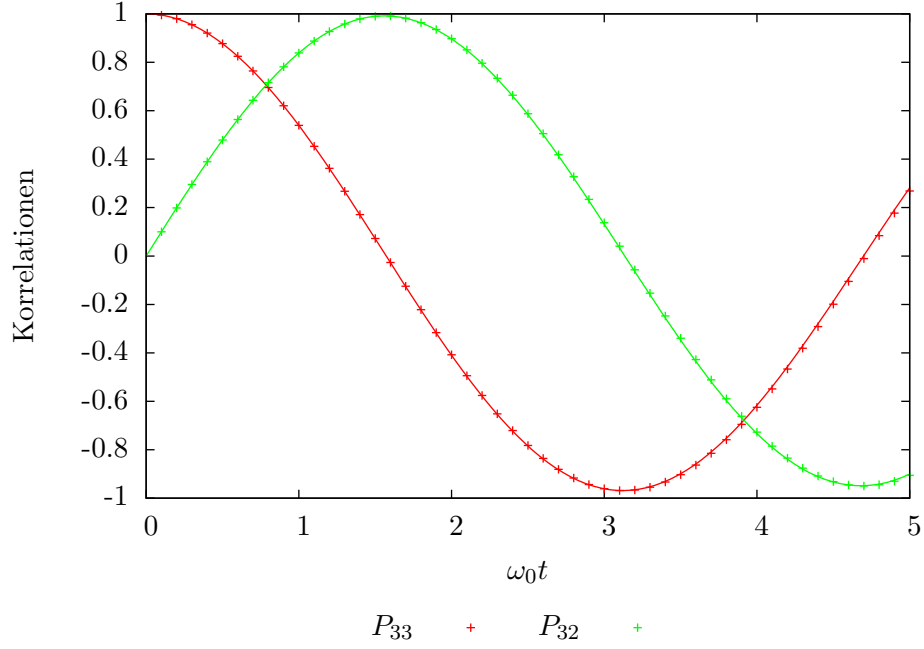


Abbildung 5.4: Vergleich der berechneten Korrelationen P_{33} und P_{32} mit der Magnus-Entwicklung und der analytischen Näherung in Gleichung (4.41). Die Datenpunkte stammen aus den Rechnungen mit der Magnus-Entwicklung, die Kurve ist die analytische Näherung.

den die Korrelationen P_{13} und P_{12} mit der Magnus-Entwicklung und der analytischen Näherung berechnet. Die Kurven zeigen in diesem Fall deutliche Abweichungen, anders als bei der Parallelkorrelation oder der Normalkorrelation. Die Dynamik zwischen den Kurven unterscheidet sich sichtbar, also kann ein qualitativer Unterschied zwischen den Methoden erkannt werden. Insbesondere liegen die absoluten Abweichungen in der gleichen Größenordnung wie die Korrelationen in der Magnus-Entwicklung selbst. Daraus kann unmittelbar geschlossen werden, dass die Magnus-Entwicklung zur Berechnung der Kreuzkorrelation nicht geeignet ist. Zum Vergleich der Fehler in den Korrelationen werden die Abweichungen

$$\Delta P_{ij} = |P_{ij,m} - P_{ij,a}| \quad (5.76)$$

zwischen den Korrelationen $P_{ij,m}$ aus der Magnus-Entwicklung und den Korrelationen $P_{ij,a}$ aus der analytischen Näherung untersucht. In Abbildung 5.6 sind diese Abweichungen dargestellt. Daraus geht hervor, dass die Abweichung ΔP_{11} deutlich kleiner als die übrigen Abweichungen ist. Diese liegen alle in einer Größenordnung, allerdings

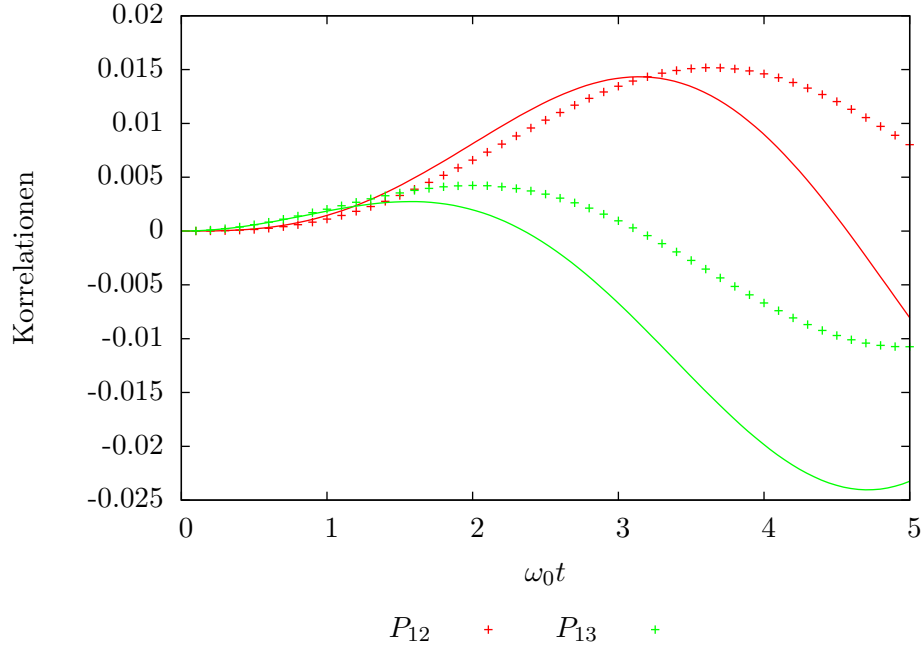


Abbildung 5.5: Vergleich der berechneten Korrelationen P_{13} und P_{12} mit der Magnus-Entwicklung und der analytischen Näherung in Gleichung (4.41). Die Datenpunkte stammen aus den Rechnungen mit der Magnus-Entwicklung, die Kurve ist die analytische Näherung.

muss berücksichtigt werden, dass die Abweichung ΔP_{12} und ΔP_{13} in der selben Größenordnung wie $P_{12,m}$ und $P_{13,m}$ selbst liegt. Daher sind die Ergebnisse aus der Magnus-Entwicklung für die Nichtdiagonalelemente P_{12} , P_{21} , P_{23} und P_{32} nicht sehr zuverlässig.

Die Abweichungen legen nahe, in den folgenden Untersuchungen die Korrelationen P_{12} , P_{21} , P_{13} und P_{31} auszulassen. Die berechneten Daten zeigen zu starke Abweichungen, als dass die Kurven verlässliche Aussagen über das Verhalten der entsprechenden Korrelationen zulassen.

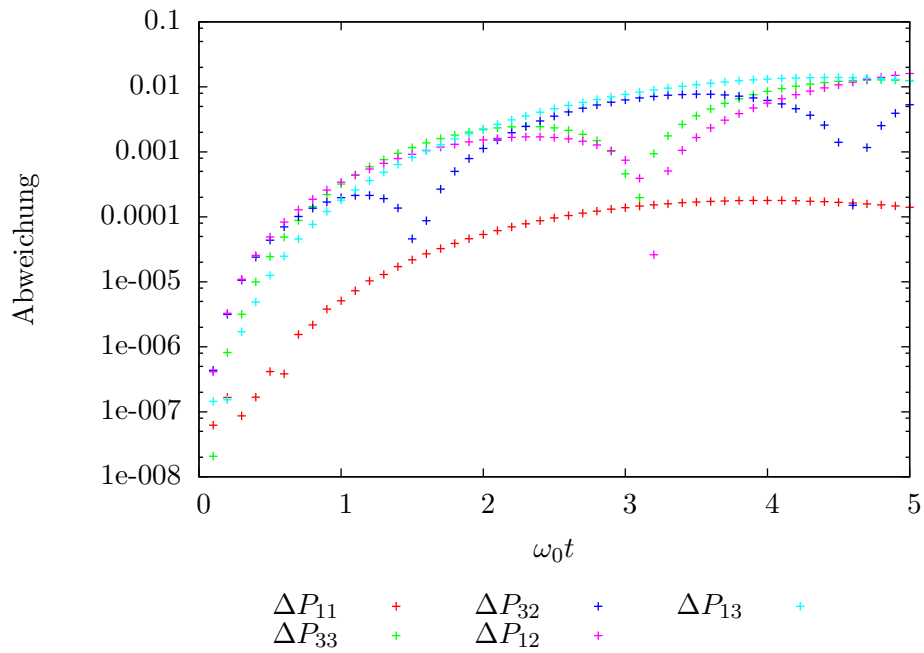


Abbildung 5.6: Absoluter Fehler in den Gleichungen (5.51a) und (5.51b) für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung $\kappa = 0.5\omega_0$.

5.6.2 Parameterabhängigkeit der Korrelationen

In Abbildung 5.7 ist die Parallelkorrelation P_{11} für verschiedene Winkel α dargestellt. Dabei wird für die Kopplungsstärke $\kappa = 0.1\omega_0$ und die Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ gewählt. Die Kurven zeigen für alle Winkel α einen schwachen Zerfall, wobei dieser mit steigenden Winkel zunimmt mit maximal 10% für $\alpha = 1/2\pi$ bei $\omega_0 t = 100$. Daneben können für niedrige Zeiten $\omega_0 t < 35$ schwache Oszillationen in den Kurven erkannt werden. Abhängig vom gewählten Winkel verschwinden diese unterschiedlich schnell, wobei größere Winkel mit längeren Oszillationen verbunden sind. Für den Winkel $\alpha = 0$ zeigt die Parallelkorrelation keinen Zerfall, sie ist konstant. Dieser Spezialfall ist bereits in Kapitel 4.2.2 behandelt.

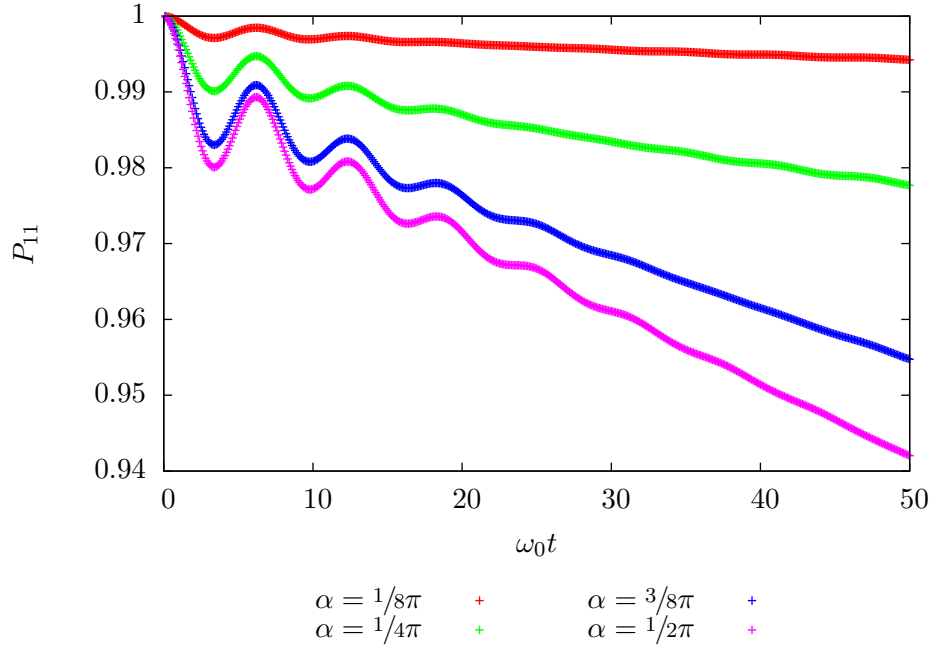


Abbildung 5.7: Die effektive Korrelation P_{11} für verschiedene Winkel α . Für die übrigen Parameter ist $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

Die entsprechende Normalkorrelation P_{33} ist in Abbildung 5.8 für verschiedene Winkel α dargestellt. Die Kurven zeigen Oszillationen, deren Frequenz näherungsweise ω_0 entspricht. Daneben kann ein Absinken der Amplitude erkannt werden, dass vom gewählten Winkel α abhängt, wobei kleine Winkel einen schnellen Zerfall und große Winkel einen langsamen Zerfall bewirken. Daher scheint die Kurve für den Winkel $\alpha = 1/8\pi$ gegen 0 zu konvergieren, während die Amplitude der Kurve für $\alpha = 1/2\pi$ nur um etwa 3% abnimmt.

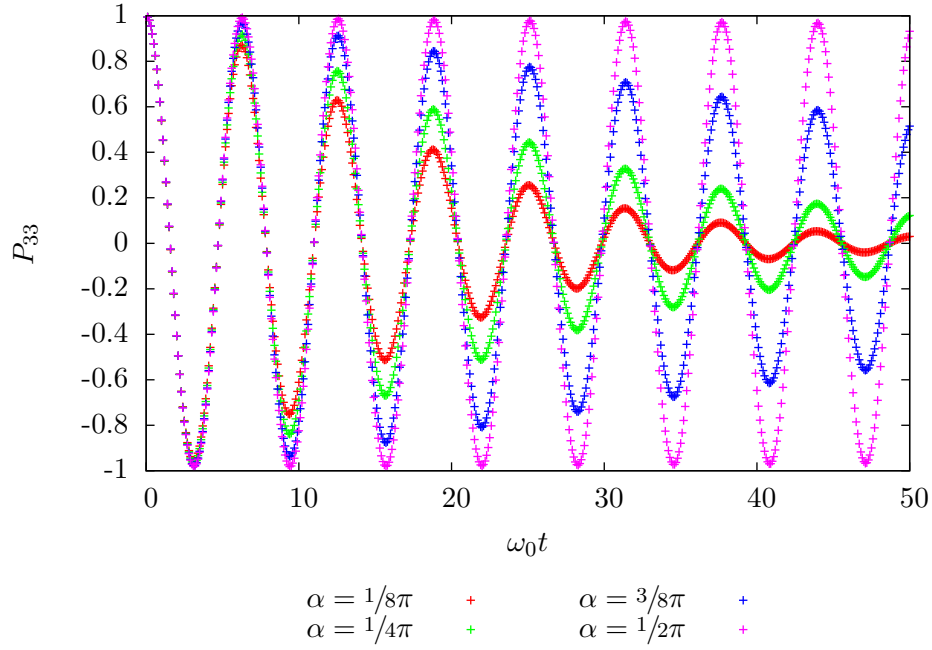


Abbildung 5.8: Die effektive Korrelation P_{33} für verschiedene Winkel α . Für die übrigen Parameter ist $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gewählt.

Als nächstes wird der Einfluss der Zeitkonstante Ω auf die Form der Korrelationen untersucht. Zur Untersuchung werden die Korrelationen P_{11} und P_{33} für verschiedene Werte Ω berechnet, wobei der Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplungsstärke $\kappa = 0.1\omega_0$ verwendet werden.

In der Abbildung 5.9 sind die Parallelkorrelationen für verschiedene Werte von Ω dargestellt. Aus der Abbildung kann abgeleitet werden, dass die Parallelkorrelation für größere Zeitkonstanten Ω schneller abfällt. Diese Beobachtung bezieht sich allerdings nicht auf kleinen Zeiträume, bei denen die Korrelationen für große Zeitkonstanten Ω langsamer zerfallen.

Die Normalkorrelation P_{33} zerfällt für steigende Zeitkonstanten Ω langsamer, wie in Abbildung 5.10 gezeigt wird. Im Gegensatz zur Parallelkorrelation gilt dieses Verhalten auch für kleinen Zeiten.

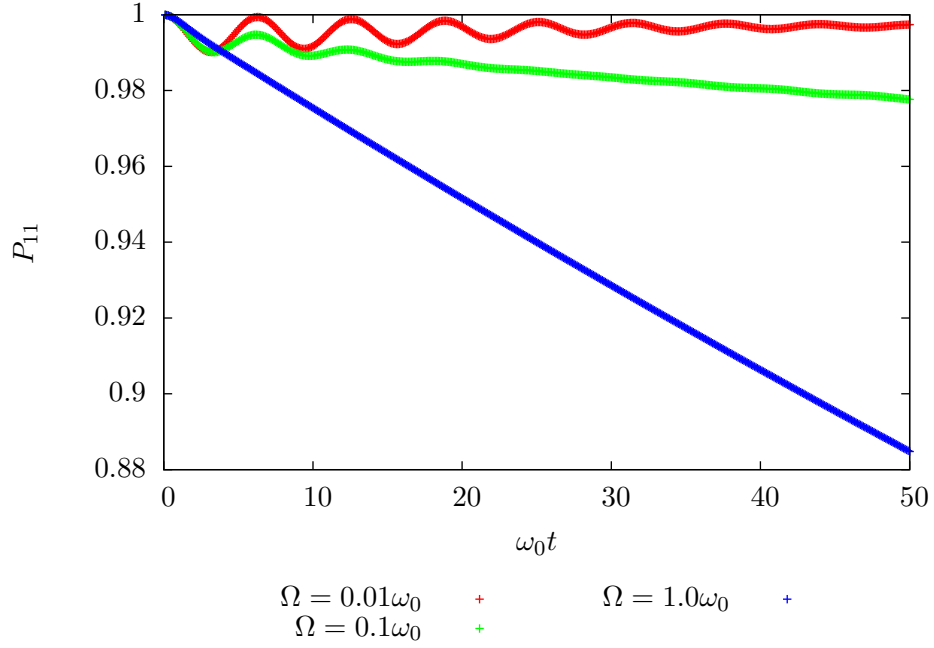


Abbildung 5.9: Die effektive Korrelation P_{11} für verschiedene Zeitkonstanten Ω . Der Winkel ist $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung ist $\kappa = 0.1\omega_0$.

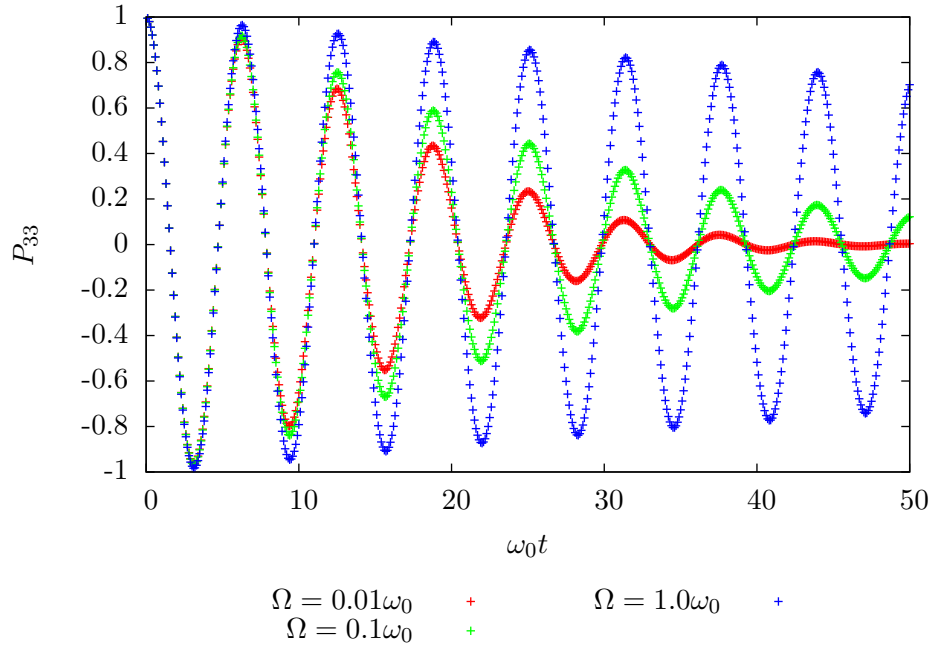


Abbildung 5.10: Die effektive Korrelation P_{33} für verschiedene Zeitkonstanten Ω . Der Winkel ist $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung ist $\kappa = 0.1\omega_0$.

5.6.3 Grenzen der Magnus-Entwicklung

Die Magnus-Entwicklung wird unter der Annahme einer schwachen Kopplung $\kappa \ll \omega_0$ verwendet. Tatsächlich zeigt sich, dass für größere Werte von κ die Korrelationen ein unerwartetes Verhalten zeigen. In Abbildung 5.11 ist die Parallelkorrelation P_{11} für drei Kopplungen mit dem Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und der Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ aufgetragen. Dabei kann bei den Kurve mit $\kappa = 0.5\omega_0$ und $\kappa = 1\omega_0$ ein Wiederanstieg erkannt werden.

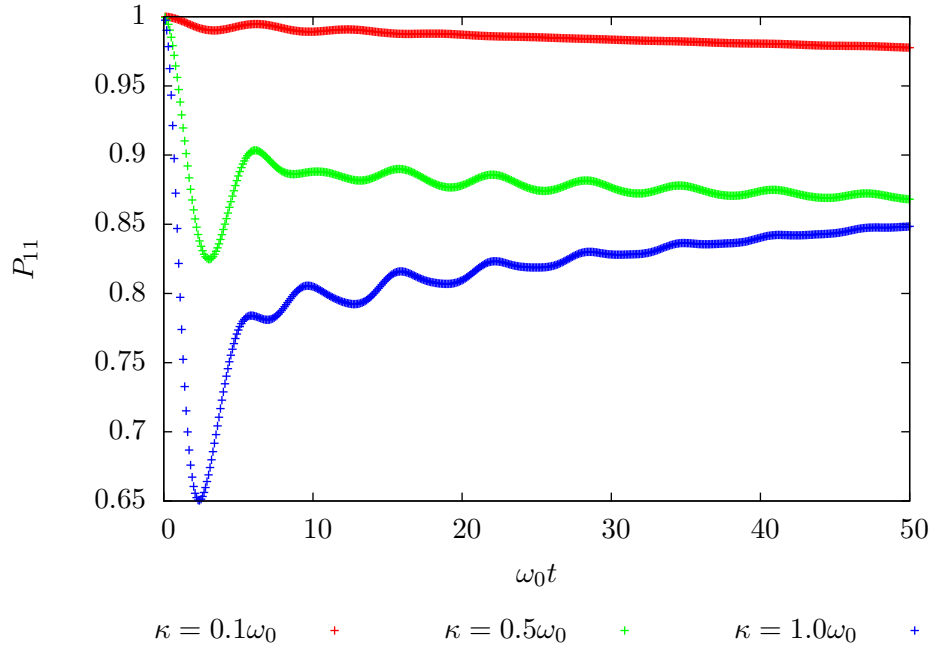


Abbildung 5.11: Die effektive Korrelation P_{11} für verschiedene Kopplungen κ . Der Winkel ist $\alpha = 1/4\pi$ und die Zeitkonstante ist $\Omega = 0.1\omega_0$.

Dieser Effekt wird in Abbildung 5.12 ebenfalls deutlich. In dieser Graphik werden die Normalkorrelationen P_{33} für die selben Parameter wie in Abbildung 5.11 dargestellt. Auch hier tritt nach dem Zerfall der Korrelation mit $\kappa = 0.5\omega_0$ und $\kappa = 1\omega_0$ ein Wiederanstieg auf, der sich in einer Oszillation um die 0 äußert. Der Wideranstieg kann ein Artefakt der Methode sein, also ein Fehler, der durch die Näherung in der Magnus-Entwicklung entsteht. Für eine Überprüfung werden in Kapitel 6 die Kurven für die selben Parameter mit einer numerischen Methode berechnet.

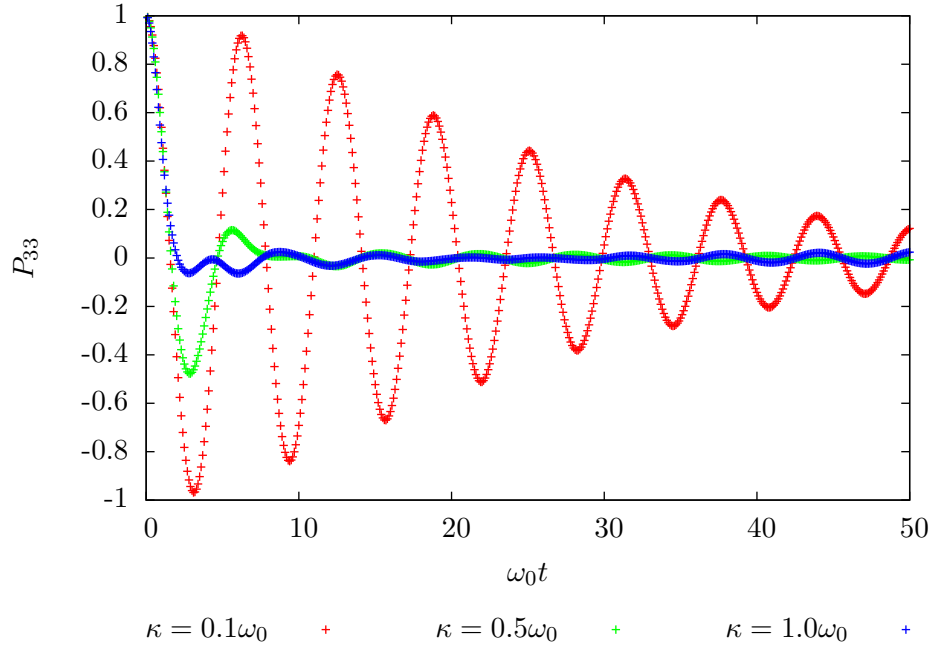


Abbildung 5.12: Die effektive Korrelation P_{33} für verschiedene Kopplungen κ . Der Winkel ist $\alpha = 1/4\pi$ und die Zeitkonstante ist $\kappa = 0.1\omega_0$.

Auch für kleine Kopplungen treten in den Korrelationen Wiederanstiege auf. In Abbildung 5.13 ist die Korrelation P_{33} für große Zeiten mit dem Winkel $\alpha = 1/4\pi$, der Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ und der Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ dargestellt. Darin kann deutlich erkannt werden, dass für $\omega_0 t > 110$ die Korrelation wieder ansteigt. Nachdem ihre Amplitude ein Maximum durchläuft, fällt sie sehr langsam wieder ab.

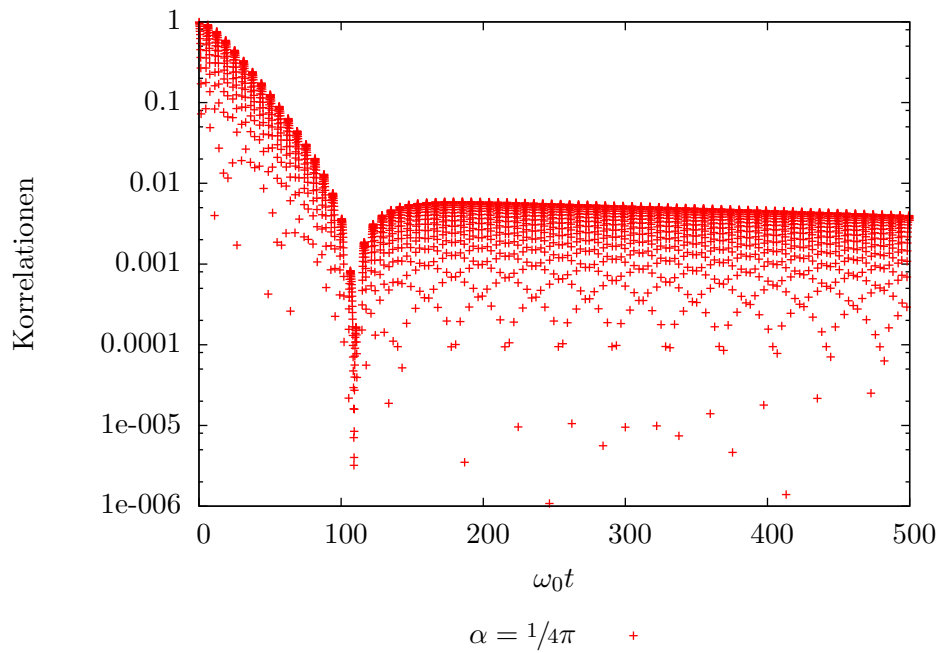


Abbildung 5.13: Die effektive Korrelation P_{33} in logarithmischer Darstellung für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$, die Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ und die Kopplung κ .

Kapitel 6

Lösung durch numerische Simulation

In Kapitel 6 werden rein numerische Verfahren und Ergebnisse beschrieben. Dafür werden zunächst die nötigen Algorithmen zur iterativen Bestimmung des Zeitentwicklungsoperators $U_D(t)$ in Gleichung (2.37) vorgestellt. Danach werden die in der Berechnung auftretenden Fehlerquellen diskutiert. Zum Schluss werden die berechneten Korrelationen analysiert.

6.1 Simulierte Größen

Im vorigen Kapitel wurde der Vektor $s(t)$ näherungsweise berechnet, indem der Zeitentwicklungsoperator $U_D(t)$ mit der Magnus-Entwicklung in linearer Ordnung von κ genähert wurde. In diesem Kapitel soll $U_D(t)$ numerisch simuliert werden. Dafür müssen zwei Dinge berücksichtigt werden.

Erstens muss ein geeignetes Verfahren zur numerischen Lösung der Differentialgleichung

$$\partial_t U_D(t) = -iH_{1,D}(t)U_D(t) \quad (6.1)$$

gefunden werden. Dafür kann zum Beispiel das Halbschrittverfahren genutzt werden, welches eine direkte zeitliche Iteration des Zeitentwicklungsoperators ermöglicht. In dieser Arbeit soll aber ein genaueres Verfahren verwendet werden, welches im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

Wegen der Zufallsvariable $\eta(t)$ in

$$H_{1,D}(t) = \frac{\kappa}{2}\eta(t)e_1^T \Sigma(t)\sigma \quad (6.2)$$

muss zweitens ein Algorithmus zur Erzeugung von gaußverteilten Zufallszahlen genutzt werden. Dabei muss gewährleistet werden, dass die Verteilungsfunktion der Zufallsvariable die geforderten Momente

$$\overline{\eta(t)} = 0 \quad (6.3a)$$

$$\overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} = e^{-\Omega|t_1-t_2|} \quad (6.3b)$$

besitzt. Die dafür verwendete Methode wird in Kapitel 3.2 vorgestellt.

6.2 Kommutatorfreie exponentielle Zeitentwicklung

Die bisherigen Methoden zur Untersuchung der Korrelationen basieren auf der Näherung erster Ordnung in der Kopplung κ zwischen Zentralspin und Umgebung. Dabei wird die Magnus-Entwicklung genutzt, um die Differentialgleichung

$$\partial_t U_D(t) = -i H_{1,D}(t) U_D(t) \quad (6.4)$$

näherungsweise zu lösen. Eine Möglichkeit der numerischen Lösung wird in Referenz [17] vorgestellt. Dort wird eine iterative Zeitentwicklung, die *commutator free exponential time evolution* kurz CFET, vorgestellt. Sie besitzt den Vorteile, dass der numerische Fehler eine höhere Potenz im Zeitschritt besitzt als zum Beispiel das Halbschrittverfahren. In Referenz [17] werden zwei Verfahren mit einem Fehler der Ordnung δt^4 und ein Verfahren der Ordnung δt^6 beschrieben. In dieser Arbeit wird dabei die einfachste Form des Algorithmus benutzt, da durch die endliche Stichprobe in der Mittelung bezüglich der Zufallsvariable $\eta(t)$ der entscheidende Fehlerquelle gegeben ist, wie in Kapitel 6.4 gezeigt wird. In der CFET treten die Gewichte $x_{1/2}$ und $g_{1/2}$ auf, die als

$$x_{1/2} := \frac{1}{2} \mp \frac{\sqrt{3}}{6} \quad (6.5a)$$

$$g_{1/2} := \frac{1}{4} \mp \frac{\sqrt{3}}{6} \quad (6.5b)$$

definiert sind. Da in der numerische Berechnung keine diskrete Zeitdarstellung möglich ist, wird der Operator $U_D(t)$ in Zeitschritten δt iterativ bestimmt. Dabei wird die Notation

$$U_{D,n} := U_D(n\delta t) \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \quad (6.6)$$

verwendet. Der vorgestellte CFET-Algorithmus benötigt den Wechselwirkungsoperator $H_{1,D}(t)$ zu den Zeitpunkten $n\delta t + x_{1/2}\delta$, wobei für eine übersichtlichere Formel die Abkürzung

$$H_{1,D,n+x_{1/2}} := H_{1,D}((n + x_{1/2})\delta t) \quad (6.7)$$

genutzt wird. Damit kann die Iterationsgleichung

$$U_{D,n+1} = e^{(\delta t(g_1 H_{1,D,n+x_1} + g_2 H_{1,D,n+x_2}))} e^{(\delta t(g_2 H_{1,D,n+x_2} + g_1 H_{1,D,n+x_1}))} U_{D,n} \quad (6.8)$$

gefunden werden (vergleiche Referenz [17], Gleichung (11)). Die zwei Vektoren $\mathbf{B}_1$ und $\mathbf{B}_2$ werden gemäß

$$\mathbf{B}_{1/2,n} := (g_{1/2}\eta_{n+x_1} \boldsymbol{\Sigma}_{1,n+x_1} + g_{2/1}\eta_{n+x_2} \boldsymbol{\Sigma}_{1,n+x_2}) \quad (6.9)$$

definiert, womit sich

$$U_{D,n+1} = \exp\left(-i\frac{\kappa}{2}\mathbf{B}_{1,n}\boldsymbol{\sigma}\right) \exp\left(-i\frac{\kappa}{2}\mathbf{B}_{2,n}\boldsymbol{\sigma}\right) U_{D,n} \quad (6.10)$$

ergibt. Das Produkt der Exponentialfunktionen kann mit Gleichung (3.5) vereinfacht werden, wobei der definierte Vektor

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\text{eff},n} := & \sin(B_{1,n}) \cos(B_{2,n}) \frac{\mathbf{B}_{1,n}}{B_{1,n}} + \cos(B_{1,n}) \sin(B_{2,n}) \frac{\mathbf{B}_{2,n}}{B_{2,n}} \\ & + \sin(B_{1,n}) \sin(B_{2,n}) \frac{\mathbf{B}_{1,n} \times \mathbf{B}_{2,n}}{B_{1,n} B_{2,n}} \end{aligned} \quad (6.11)$$

verwendet wird. Die Iterationsgleichung nimmt schließlich die Form

$$U_{D,n+1} = \left[\cos(B_{1,n}) \cos(B_{2,n}) - \sin(B_{1,n}) \sin(B_{2,n}) \frac{\mathbf{B}_{1,n} \mathbf{B}_{2,n}}{B_{1,n} B_{2,n}} - i \mathbf{B}_{\text{eff},n} \boldsymbol{\sigma} \right] U_{D,n} \quad (6.12)$$

an. Mit dieser Vorschrift ist eine direkte Iteration in der Zeit möglich. Einzig die Erzeugung der Zufallszahlen η_n muss noch geeignet implementiert werden.

6.3 Fluktuierende Zufallszahl

Der Erzeugung von Zufallszahlen mit exponentieller Korrelation sind schon lange ein wichtiges Werkzeug zur Simulation statistischer Systeme. In Referenz [18] sind zwei Algorithmen vorgestellt. Die beiden Methoden unterscheiden sich in der Genauigkeit. Dabei verbessert der zweite Algorithmus die Zufallszahlen, wenn die Zerfallskonstante Ω in der Korrelation groß gegenüber den gewählten Zeitschritten δt ist. Für die in der Arbeit betrachteten Fälle trifft das nicht zu, da Ω meist klein ist. Daher wird der erste Algorithmus verwendet.

Als Ausgangsbasis wird die Differentialgleichung

$$\dot{\eta}(t) = -\Omega \eta(t) + \Omega h(t) \quad (6.13)$$

genutzt. Hierbei ist $h(t)$ eine gaußverteilte Störung mit

$$\overline{h(t_1)} = 0 \quad (6.14a)$$

$$\overline{h(t_1)h(t_2)} = 2D\delta(t_1 - t_2). \quad (6.14b)$$

Die analytische Lösung der Differentialgleichung lautet

$$\eta(t) = \exp(-\Omega t) \eta_0 + \Omega \int_0^t ds \exp(-\Omega(t-s)) h(s). \quad (6.15)$$

Für den Mittelwert und die Varianz sollen die Relationen in den Gleichungen (6.3a) und (6.3b) gelten. Für den Mittelwert gilt

$$\overline{\eta(t)} = \exp(-\Omega t) \overline{\eta_0} + \Omega \int_0^t ds \exp(-\Omega(t-s)) \underbrace{\overline{h(s)}}_{=0 \text{ nach (6.14a)}} \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.16)$$

Um die Bedingung in Gleichung (6.3a) zu erfüllen, wird ein gaußverteilttes η_0 mit verschwindendem Mittelwert $\overline{\eta_0} = 0$ genutzt. Dann ist $\eta(t)$ offensichtlich die gewichtete Summe aus gaußverteilten Zufallsvariablen und somit selbst gaußverteilt.

Für die Autokorrelationsfunktion von $\eta(t)$ folgt mit $\overline{\eta_0 h(t)} = 0$ weiter

$$\overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} = e^{-\Omega(t_1+t_2)}\overline{\eta_0^2} + \Omega^2 e^{-\Omega(t_1+t_2)} \int_0^{t_1} ds_1 \int_0^{t_2} ds_2 e^{\Omega(s_1+s_2)} \overline{h(s_1)h(s_2)} \quad (6.17a)$$

Durch Einsetzen der Autokorrelation von $h(t)$ folgt für $t_1 > t_2$ weiter

$$\overline{\eta(t_1)\eta(t_2)} = e^{-\Omega(t_1+t_2)}\overline{\eta_0^2} + 2D\Omega^2 e^{-\Omega(t_1+t_2)} \int_0^{t_2} ds_2 e^{2\Omega s_2} \quad (6.17b)$$

$$= e^{-\Omega(t_1+t_2)}\overline{\eta_0^2} + D\Omega e^{-\Omega(t_1+t_2)} (e^{2\Omega t_2} - 1) \stackrel{!}{=} e^{-\Omega(t_1-t_2)} \quad (6.17c)$$

Um die geforderte Autokorrelation von $\eta(t)$ zu erhalten, muss für den freien Parameter

$$D = \Omega^{-1} \quad (6.18)$$

gewählt werden. Desweiteren muss

$$\overline{\eta_0^2} = D\Omega = 1 \quad (6.19)$$

gelten. Also muss für η_0 die Verteilungsfunktion

$$P(\eta_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\left(-\frac{\eta_0^2}{2}\right)} \quad (6.20)$$

gewählt werden. Mit diesem Verfahren können Zufallszahlen $\eta(t)$ mit den geforderten Eigenschaften erzeugt werden.

Die nötigen gaußverteilten Zufallszahlen können mit geeigneten Generatoren erzeugt werden. In dieser Arbeit wird die Box-Müller-Methode verwendet, die in Referenz [19] vorgestellt wird. Mit diesem Algorithmus werden die Zufallsvariablen η_0 und $h(t)$ generiert, wobei im diskreten Fall die Varianzen

$$\sigma_{\eta_0}^2 = 1 \quad (6.21a)$$

$$\sigma_h^2 = \frac{2D}{\delta t} = \frac{2}{\Omega \delta t} \quad (6.21b)$$

verwendet werden.

Zur Kontrolle der Zufallszahlen können Mittelwert und Varianz der Größe $\eta(t)$ bestimmt werden. In den Abbildungen 6.1(a) und 6.1(b) sind der Mittelwert $\overline{\eta(t)}$ und die Abweichung $\Delta g(t_1 - t_2) = e^{-\Omega|t_1-t_2|} - \overline{\eta(t_1)\eta(t_2)}$ für unterschiedlich viele Konfigurationen N_η dargestellt. Hieraus wird erkennbar, dass mit wachsender Konfigurationszahl der Fehler absinkt.

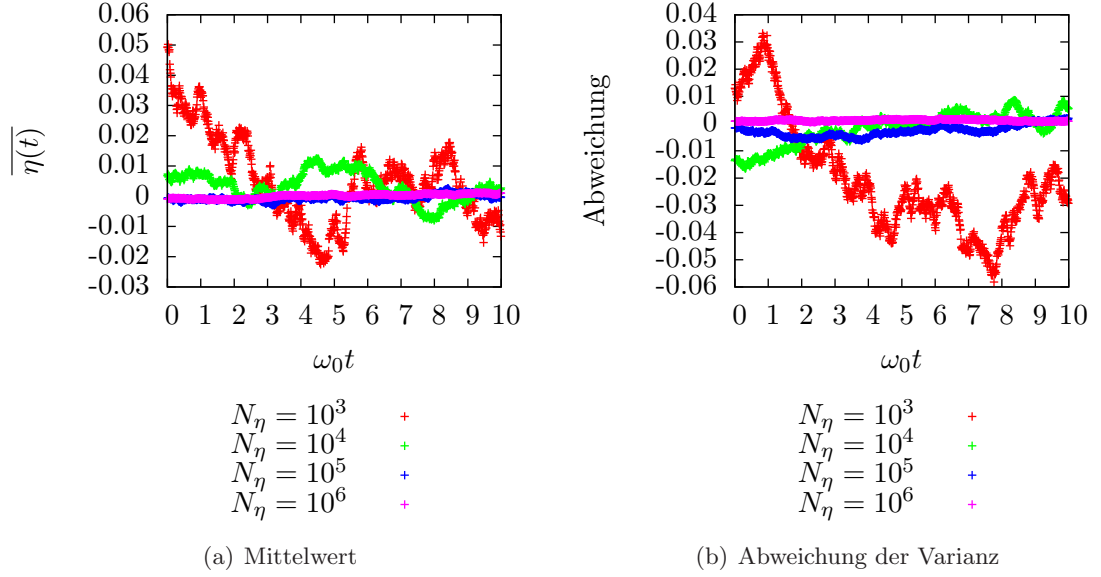


Abbildung 6.1: Mittelwert $\overline{\eta(t)}$ und Abweichung $\Delta g(t_1 - t_2)$ von der erwarteten Varianz für die Fluktuation $\eta(t)$ bei verschiedenen vielen Konfigurationen N_η . Die Zeitkonstante ist $\Omega = 0.1\omega_0$.

6.4 Numerische Fehlerquellen

Aufgrund der endlichen Stichprobe muss von einem relativen Fehler von $1/\sqrt{N}$ bei der Mittelung über die Fluktuation $\eta(t)$ ausgegangen werden. Dies kann aus den Abbildungen 6.2(a) und 6.2(b) geschlossen werden. Dabei sind neben den numerischen Werten die entsprechenden Fehlergrenzen eingetragen. Aus diesem Grund ist die Mittelung über endlich viele Konfigurationen eine entscheidende Fehlerquelle. Die Rechenzeit steigt schnell stark an, wenn niedrige statistische Fehler erreicht werden sollen. Die numerischen Fehler in der Berechnung des Operators $U_D(t)$ sind durch den verwendeten CFET-Algorithmus proportional zu $(\delta t)^4$ und können damit beim verwendeten Zeitschritt $\delta t = 10^{-1}$ als vernachlässigbar angenommen werden.

6.5 Vergleich mit bekannten Ergebnissen

Bevor die Ergebnisse für unbekannte Parameterbereiche aus den numerischen Rechnungen präsentiert werden, soll die Korrektheit des Algorithmus gezeigt werden. Dafür werden die generierte Daten mit den Ergebnissen für zwei bekannte Fälle verglichen. Für $\alpha = 0$ und für $\Omega = 0$ können die entsprechenden Zeitentwicklungsoperatoren ohne Magnus-Entwicklung oder CFET berechnet werden (siehe Kapitel 4.2.2 und 4.3). Für den Vergleich zwischen der numerischen und der direkten Berechnung wird die

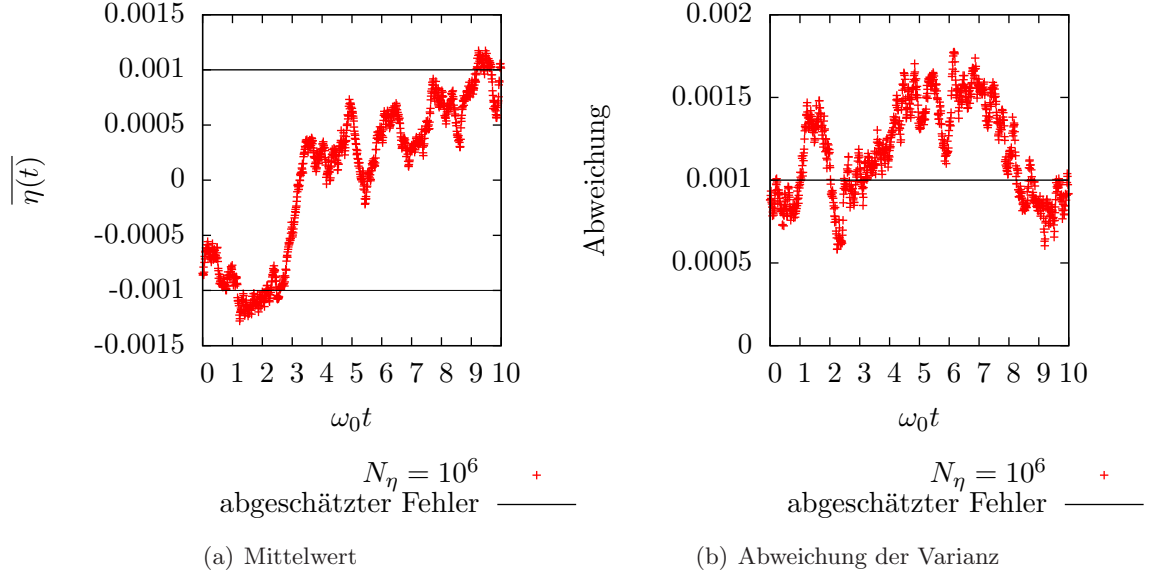


Abbildung 6.2: Mittelwert $\overline{\eta(t)}$ und Abweichung $\Delta g(t_1 - t_2)$ von der erwarteten Varianz für die Fluktuation $\eta(t)$ bei $N_\eta = 10^6$ Konfigurationen. Zusätzlich ist der erwartete statistische Fehler eingetragen. Die Zeitkonstante ist $\Omega = 0.1\omega_0$.

Differenzmatrix $\Delta \mathbf{C}$ betrachtet, welche durch

$$\Delta \mathbf{C} = \mathbf{C}_{\text{CFET}} - \mathbf{C}_{\text{direkt}} \quad (6.22)$$

definiert ist. In Abbildung 6.3 werden die Frobeniusnormen für die beiden Fälle dargestellt. Als statistischer Fehler kann für alle Komponenten $\Delta_N = 10^{-3}$ angenommen werden. Für die Frobeniusnorm ergibt sich damit ein statistischer Fehler von $\Delta_F = 3 \cdot 10^{-3}$. Dieser Wert wird von beiden Kurven in der Tat nicht überschritten. Damit ist überprüft, dass der Algorithmus das System richtig beschreibt.

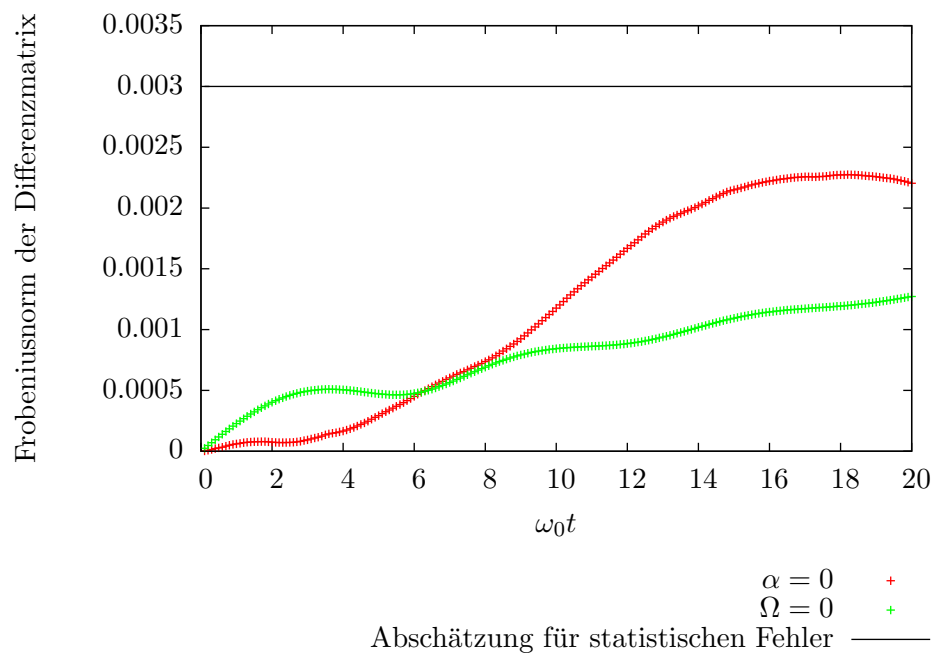


Abbildung 6.3: Abweichung zwischen der Korrelationsmatrix aus der Simulation und der Korrelationsmatrix aus der direkten Berechnung

6.6 Spinkorrelation in der numerischen Simulation

Die Ergebnisse aus der numerischen Berechnung zeigen für viele Parameterbereiche qualitativ große Übereinstimmung mit den entsprechenden Ergebnisse in Kapitel 5. Daher werden in diesem Kapitel nur die Unterschiede zur Magnus-Entwicklung vorgestellt. Da die Relationen in Abschnitt ch: untersucht zwischen den Korrelationen auch für numerische Behandlung gültig sind, wird die Untersuchung auf die die Korrelation P_{13} beschränkt. Daneben werden die Fälle untersucht, in denen die Magnus-Entwicklung ein Wiederanstieg der Korrelationen zeigt. Dadurch kann untersucht werden, ob dies ein Artefekt der Magnus-Entwicklung ist.

Bei allen Ergebnissen muss der Fehler Δ_N durch die Mittelung über die Fluktuationen $\eta(t)$ berücksichtigt werden. Dieser liegt bei der gewählten Konfigurationszahl $N_\eta = 10^6$ bei $\Delta_N = 10^{-3}$. Daher sind Korrelationswerte in dieser Größenordnung nicht aussagekräftig, da sie Artefakte der Berechnung sein können.

6.6.1 Parameterabhängigkeit der Kreuzkorrelationen

In Abbildung 6.4 ist die effektive Korrelation P_{13} für verschiedene Winkel α dargestellt. Dabei ist die Kurve für den Fall $\alpha = 1/2\pi$ näherungsweise 0, womit die Überlegung in Kapitel 5.5.2 bestätigt ist. Dort wird argumentiert, dass die Matrixelemente F_{13} , F_{13} , F_{13} und F_{13} für $\alpha = 1/2\pi$ immer 0 sind. Wegen des Zusammenhanges zwischen der effektiven Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ und der Matrix $\mathbf{F}$ sind dann auch die entsprechenden Matrixelemente von $\mathbf{P}$ null.

Die anderen Kurven zeigen Oszillationen, deren Amplitude zunächst ansteigt. Die maximale Amplitude hängt offensichtlich vom gewählten Winkel α ab, die Frequenz entspricht für alle Winkel näherungsweise ω_0 . Nach dem Maximum fällt die Amplitude wieder ab. Dabei hängt die Geschwindigkeit von Anstieg und Zerfall der Amplitude vom Winkel ab.

Für die niedrigen Winkel erreicht die Amplitude schneller ihr Maximum, zerfällt danach aber auch schneller. So kann für den Winkel $\alpha = 1/8\pi$ bei $\omega_0 t = 100$ fast keine Oszillation mehr erkannt werden.

Die Kurve für $\alpha = 1/8\pi$ scheint gegen einen endlichen Grenzwert zulaufen, für die übrigen Kurven kann keine Aussagen getroffen werden, da sie im betrachteten Zeitbereich immernoch oszillieren. Für eine Untersuchung wird das Langzeitverhalten betrachtet. In Abbildung 6.5 sind die Korrelationen für die selben Parameter dargestellt. Daraus geht tatsächlich hervor, dass Korrelationen in der Größenordnung $1 \cdot 10^{-3} - 4 \cdot 10^{-3}$ liegen. Diese Werte können durch die statistischen Fehler bei der Mittelung entstehen, allerdings sind solch hohen Fehler nicht zu erwarten.

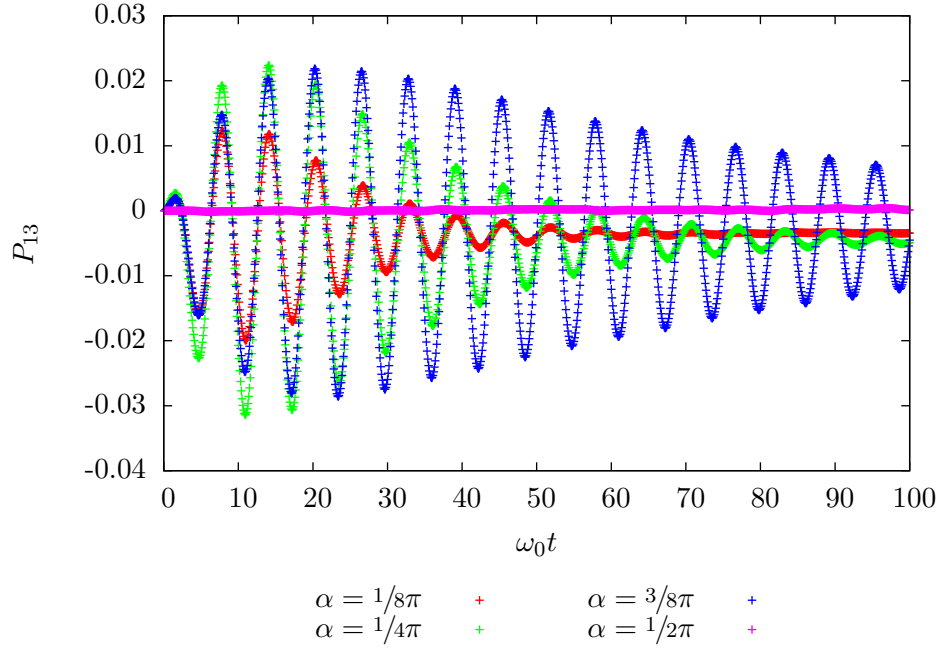


Abbildung 6.4: Effektive Korrelation P_{13} für verschiedene Winkel α . Die übrigen Parameter sind $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$.

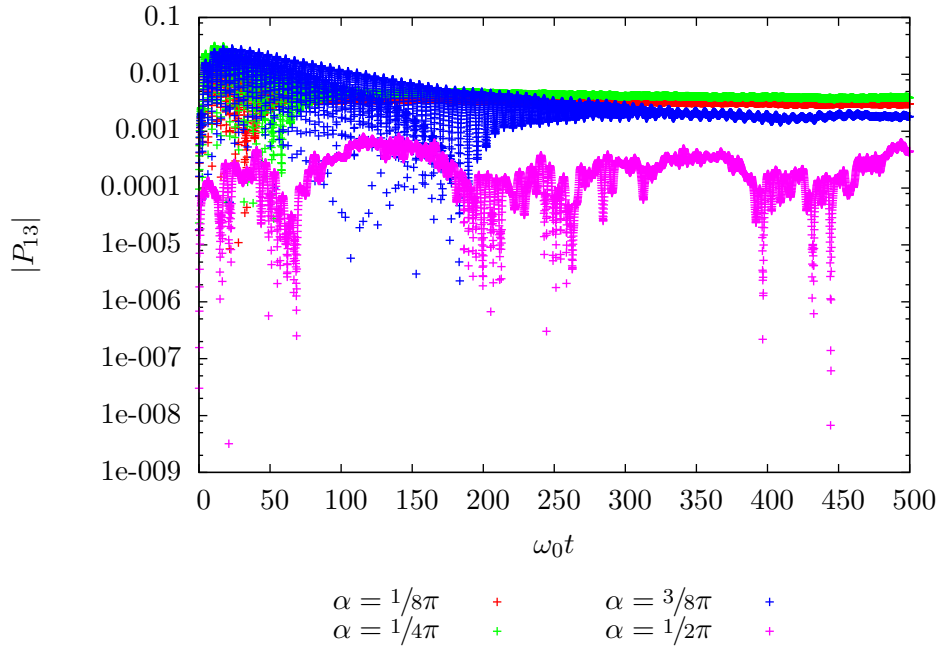


Abbildung 6.5: Effektive Korrelation P_{13} für verschiedene Winkel α für einen großen Zeitbereich. Die übrigen Parameter sind $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$.

Als nächstes wird der Einfluss der Zeitkonstante Ω auf die Form der Korrelation P_{13} untersucht. In den Abbildungen 6.6 sind die entsprechenden Korrelationen dargestellt. Dabei wird der Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplungsstärke $\kappa = 0.1\omega_0$ verwendet.

Die Kurven zeigen wieder Oszillationen mit variierenden Amplituden. Die Frequenz ist wieder näherungsweise durch ω_0 gegeben. Für niedrige Zeitkonstanten wächst die Amplitude schneller an und erreicht ein höheres Maximum. Danach zerfällt sie aber auch schneller, wie für den Fall $\Omega = 0.01\omega_0$ erkennbar ist.

Bei hohen Zeitkonstanten ist die Amplitude scheinbar konstant, im betrachteten Zeitbereich verändert sie sich fast nicht.

Die Kurven für $\Omega = 0.01\omega_0$ und $\Omega = 0.1\omega_0$ scheinen gegen einen endlichen Grenzwert zulaufen, bei der Zeitkonstante $\Omega = 1.0\omega_0$ kann dies nicht erkannt werden. Für eine Untersuchung wird wieder eine Langzeit-Entwicklung betrachtet. Die Kurven in Abbildung 6.7 zeigen unterschiedliches Verhalten. Für die große Zeitkonstante liegt die Korrelation genau in der Größenordnung des statistischen Fehlers. Für die entsprechende Korrelation kann also ein Aussterben angenommen werden. Für die beiden anderen Zeitkonstanten liegen die Korrelationen in der Größenordnung $4 \cdot 10^{-3}$, womit keine klare Aussage getroffen werden kann.

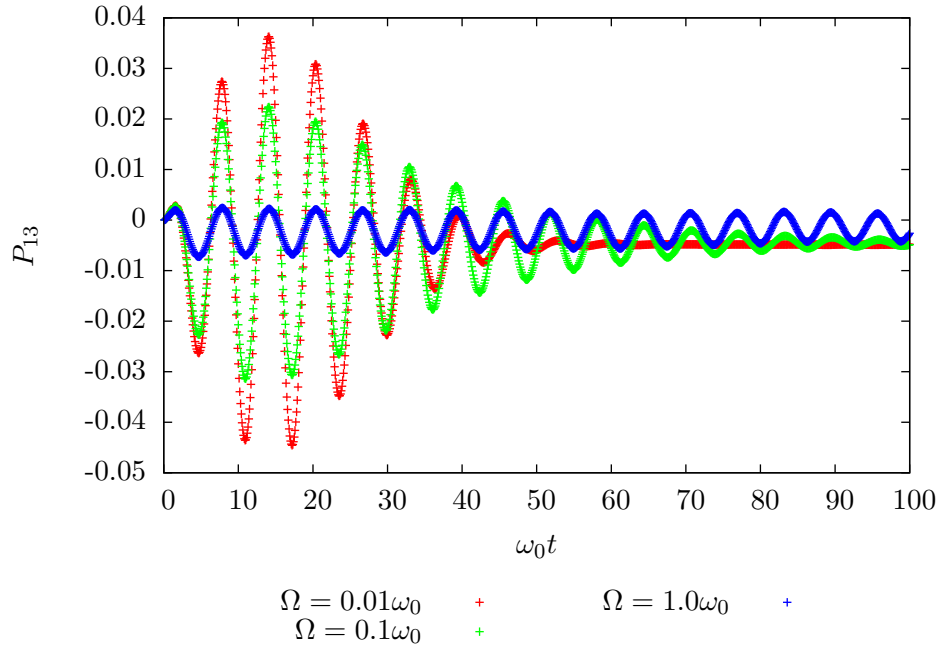


Abbildung 6.6: Effektive Korrelation P_{13} für verschiedene Zeitkonstanten Ω . Der Winkel ist hierbei $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung ist $\kappa = 0.1\omega_0$.

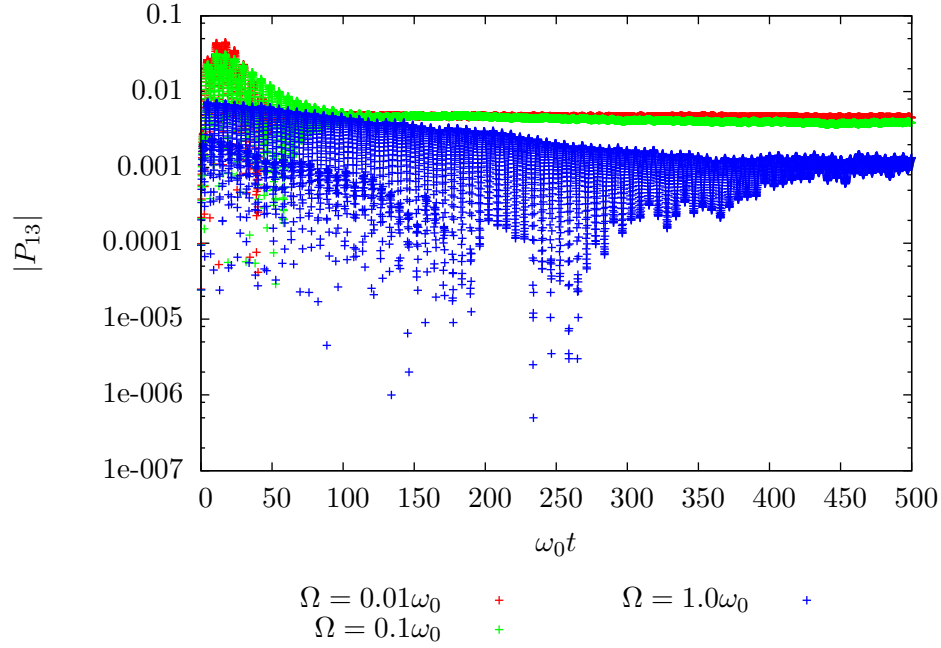


Abbildung 6.7: Absolutwert der Korrelation P_{13} für verschiedene Zeitkonstanten Ω . Der Winkel ist hierbei $\alpha = 1/4\pi$ und die Kopplung ist $\kappa = 0.1\omega_0$.

6.6.2 Verhalten für große Zeiten und starke Kopplungen

Im Gegensatz zur analytischen Näherung in Kapitel 4.4.2 und der Magnus-Entwicklung in Kapitel 5 stellt die numerische Simulation keine Näherung in der Kopplung κ da, weshalb die berechneten Daten auch für größere Werte bis auf numerische und statistische Fehler richtig sind.

Wenn die Kopplung an die Umgebung durch Dekohärenz die Korrelationen $\mathbf{P}$ zerstört, sollte dies in den numerischen Daten sichtbar sein. Die Magnus-Entwicklung zeigt einen Wiederanstieg in den Korrelationen, was vermutlich ein Effekt der Näherung ist. Daher werden in diesem Abschnitt die Korrelationen für größere Parameter κ und größere Zeiten t untersucht.

In Abbildung 6.8 ist die effektive Korrelation P_{11} für verschiedene Kopplungen κ dargestellt, wobei der Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und die Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ gewählt sind.

Im Fall $\kappa = 0.1\omega_0$ fällt P_{11} sehr langsam ab, was qualitativ mit dem Ergebnis in der Magnus-Entwicklung übereinstimmt. Für die beiden höheren Kopplungen zeigt sich aber ein gänzlich anderes Verhalten der Korrelation. Für $\kappa = 0.5\omega_0$ zerfällt P_{11} im Zeitbereich bis $\omega_0 t \approx 400$ und zeigt danach keinen Wiederanstieg. Für die stärker Kopplung zerfällt die Korrelation schneller und steigt auch hier nicht wieder an. Damit ist bestätigt, dass die Magnus-Entwicklung bei der Korrelation P_{11} eine fehlerhafte fehlerhafte Dynamik beschreibt, wenn die Kopplung κ zu stark ist.

Die Korrelation P_{33} zeigt in der Magnus-Entwicklung auch für schwache Kopplungen

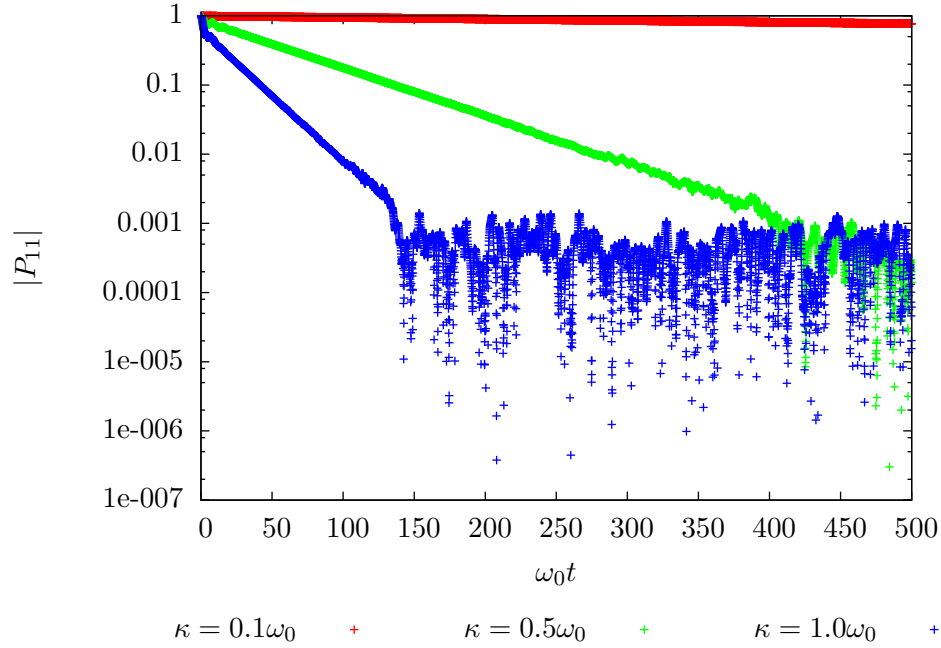


Abbildung 6.8: Absolutwert der Korrelation P_{11} für verschiedene Kopplungen κ , den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und der Zeitkonstanten $\Omega = 0.1\omega_0$ in logarithmischer Darstellung.

einen Wiederanstieg, wie in Abbildung 5.13 zu erkennen ist. Da der entsprechende Effekt bei der Korrelation P_{11} ein Artefakt der Magnus-Entwicklung ist, kann erwartet werden, dass dies für diesen Fall auch zutrifft. In Abbildung 6.9 ist die Korrelation P_{33} für den Winkel $\alpha = \frac{1}{4}\pi$, die Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ und die Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ dargestellt. Offensichtlich tritt kein Wiederanstieg der Korrelation auf, P_{33} ist bei $\omega_0 t \approx 150$ vollständig zerfallen.

Für größere Kopplungen zerfällt die Korrelation entsprechend schneller und steigt nicht wieder an. Damit kann bestärkt werden, dass die wiederkehrenden Korrelationen durch die Näherung der Magnus-Entwicklung entstehen. Abschließend wird die Korrelation P_{13} betrachtet. Hier kann kein sinnvoller Vergleich mit der Magnus-Entwicklung getroffen werden, da die Daten in der Magnus-Entwicklung schon für kleine Zeiten gravierende Fehler zeigt. Insbesondere sind die Fehle in der selben Größenordnung wie die Korrelation selbst.

In Abbildung 6.10 ist die Korrelation P_{13} für verschiedene Kopplungen κ dargestellt. Die verwendeten Parameter sind wieder $\alpha = 1/4\pi$ und $\Omega = 0.1\omega_0$. Für die Kopplungen $\kappa = 0.5\omega_0$ und $\kappa = 1.0\omega_0$ zerfällt die Korrelation im betrachteten Zeitbereich. Die Daten für $\kappa = 0.1\omega_0$ lassen keine eindeutige Aussage zu. Die Kurve zerfällt möglicherweise über einen größeren Zeitraum als der hier betrachtete, was aber aus den vorliegenden Daten nicht abgeleitet werden kann.

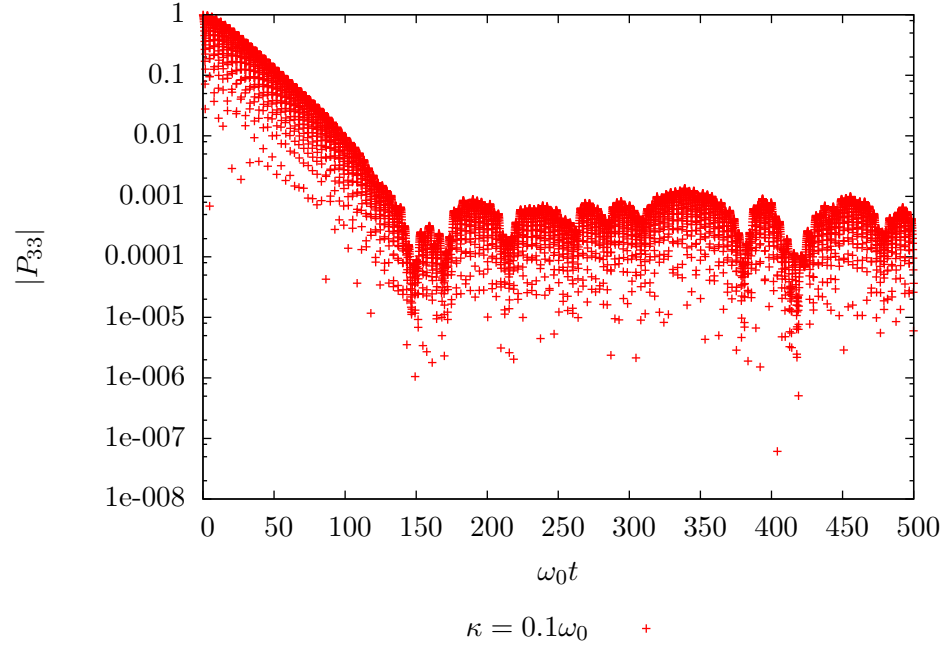


Abbildung 6.9: Absolutwert der Korrelation P_{33} für die Kopplungen $\kappa = 0.1\omega_0$, dem Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und der Zeitkonstanten $\Omega = 0.1\omega_0$ in logarithmischer Darstellung.

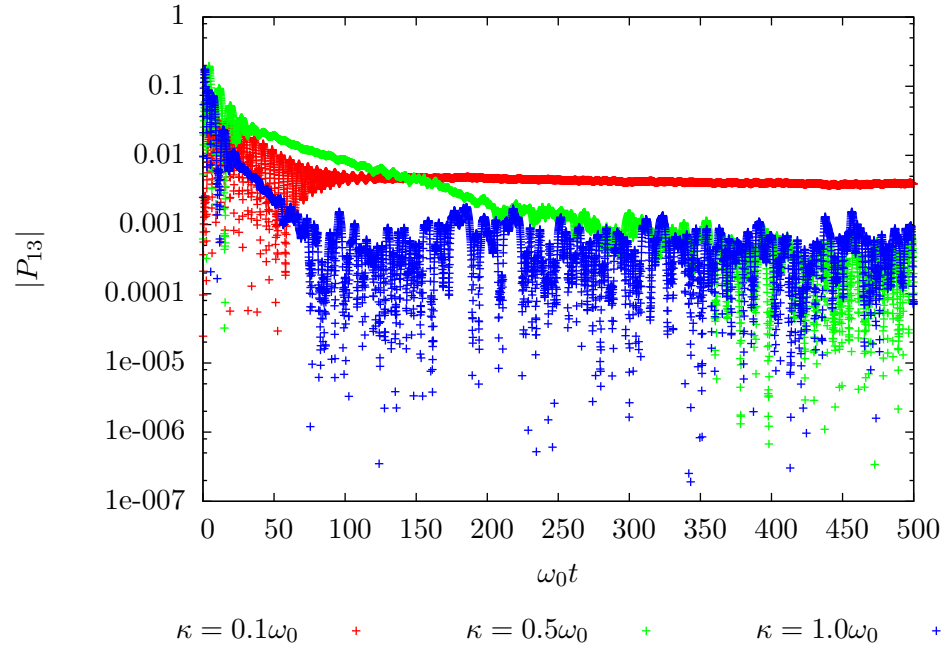


Abbildung 6.10: Absolutwert der Korrelation P_{13} für verschiedene Kopplungen κ , dem Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und der Zeitkonstanten $\Omega = 0.1\omega_0$ in logarithmischer Darstellung.

Kapitel 7

Vergleich

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der Magnus-Entwicklung in Kapitel 5 und der numerischen Berechnung in Kapitel 6 quantitativ verglichen werden.

7.1 Differenzmatrix und Frobeniusnorm

Der Unterschied zwischen den vorgestellten Methoden liegt in der Berechnung der Matrix $\mathbf{F}$, die nach Gleichung (4.42c) wesentlich zur Berechnung der Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ ist. Für die Untersuchung der qualitativen Unterschiede wird die Differenzmatrix $\Delta\mathbf{F}$ definiert. Die Matrizen $\mathbf{F}$ aus den verschiedenen Methoden werden mit den Buchstaben m für die Magnus-Entwicklung und s für die numerische Simulation indiziert. Damit wird die Differenzmatrix

$$\Delta\mathbf{F} := \mathbf{F}_m - \mathbf{F}_s \quad (7.1)$$

definiert. Zur Berücksichtigung aller Matrixelemente von $\Delta\mathbf{F}$ wird die Frobeniusnorm verwendet, die in Kapitel 3.4 definiert wird. Die Normen werden dabei mit den entsprechenden Buchstaben indiziert, also gilt

$$n_F := \|\Delta\mathbf{F}\|_F \quad (7.2)$$

Neben der quantitativen Fehleranalyse der Magnus-Entwicklung kann auch das Verhalten der einzelnen Matrixelemente untersucht werden. Wegen der Reihenentwicklung in Gleichung (5.11a) werden die Diagonalelemente in höhere Ordnung von κ genähert als die Nichtdiagonalelemente. Dies soll überprüft werden.

7.2 Analyse der Frobeniusnorm

Zur Untersuchung der Parameterabhängigkeit der Frobeniusnorm $n_m = \Delta\mathbf{F}_m$ wird die Norm für verschiedene Parameterkonfigurationen bestimmt.

In Abbildung 7.1 wird die Frobeniusnorm n_m für verschiedene Winkel $a\alpha$ dargestellt,

wobei für die beiden übrigen Parameter $\Omega = \kappa = 0.1\omega_0$ gilt. Aus der Abbildung kann direkt erkannt werden, dass die Magnus-Näherung für steigende Winkel ungenauer wird. Für den Winkel $\alpha = 0$ entspricht die Magnus-Entwicklung erster Ordnung in κ nach Kapitel 5.5.1 der exakten Lösung. Denn die erste Korrektur ist der Vektor $\mathbf{v}^{(2)}$, der nach Gleichung (5.6) proportional zu $\sin(\alpha)$ ist, verschwindet also für $\alpha = 0$. Mit steigendem Winkel α werden also die Korrekturen wichtiger, wie Abbildung 7.1 bestätigt.

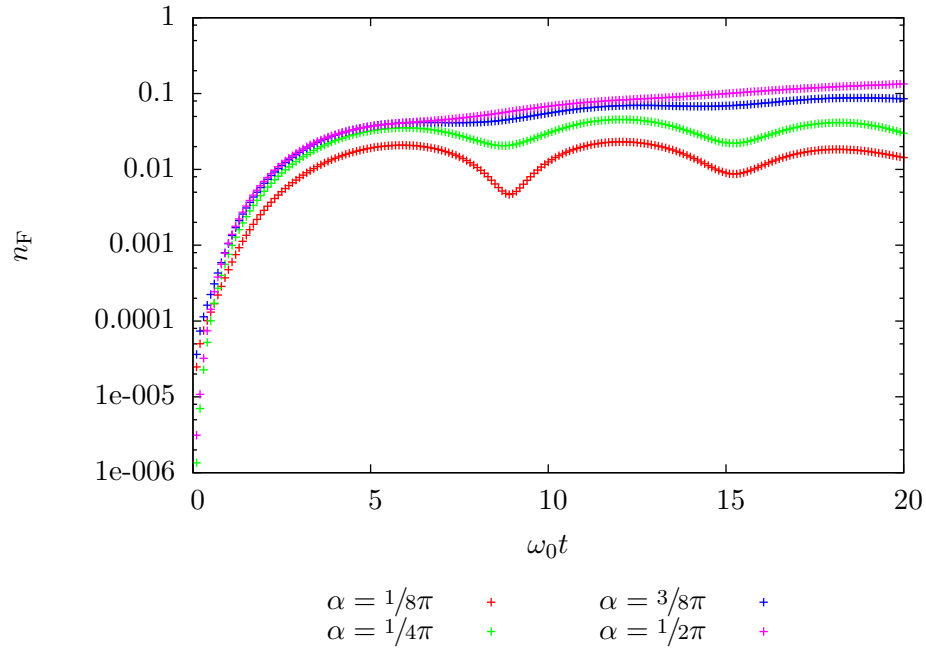


Abbildung 7.1: Frobeniusnorm n_m für verschiedene Winkel α bei fester Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ und Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$.

In Abbildung 7.2 ist die Norm n_m für verschiedene Zeitkonstanten Ω dargestellt, wobei für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$ und für die Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ gelten. Aus der Abbildung kann abgelesen werden, dass größere Zeitkonstanten eine genauere Näherung durch die Magnus-Entwicklung bedingen.

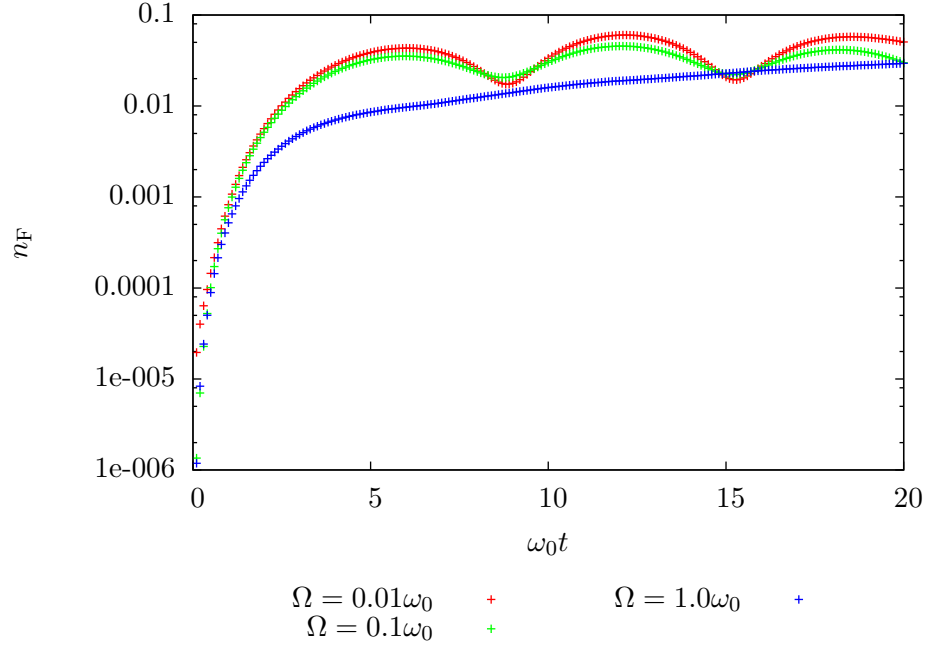


Abbildung 7.2: Frobeniusnorm n_m für verschiedene Zeitkonstanten Ω bei fester Kopplung $\kappa = 0.1\omega_0$ und festem Winkel $\alpha = 1/4\pi$.

Als letztes wird der Einfluss der Kopplung κ auf die Genauigkeit der Magnus-Entwicklung untersucht. In Abbildung 7.3 kann erkannt werden, dass die Abweichung für eine steigende Kopplung κ größer wird. Dies folgt direkt aus der Tatsache, dass die höheren Ordnung der Magnus-Reihe die Proportionalität $\mathbf{v}^{(n)} \propto \kappa^n$ erfüllen. Da alle Terme mit $n > 1$ in der Entwicklung vernachlässigt werden, muss die Näherung für höhere Kopplungen schlechter werden.

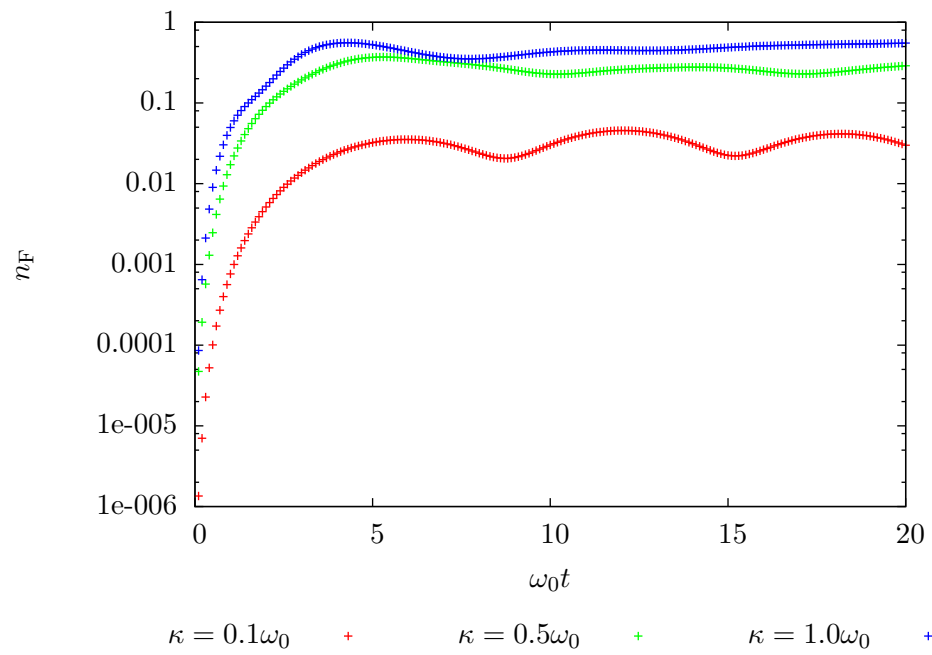


Abbildung 7.3: Frobeniusnorm n_m für verschiedene Kopplungen κ bei festem Winkel $\alpha = \frac{1}{4}\pi$ und fester Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$.

7.3 Analyse der Matricelemente

Die Fehler der Matricelemente F_{ij} in der verwendeten Magnus-Entwicklung zeigen unterschiedliche Abhängigkeiten von κ . Die Diagonalelemente sind bis zur Ordnung κ^4 genau bestimmt. Die Nichtdiagonalelemente besitzen einen Fehler der Ordnung κ^2 . Diese Überlegungen aus der anyltischen Rechnung können im Vergleich zwischen den Ergebnissen aus Magnus-Entwicklung und numerischer Simulation verifiziert werden. In Abbildung 7.4 sind die Matricelemente für den Winkel $\alpha = 1/4\pi$, die Zeitkonstante $\Omega = 0.1\omega_0$ und verschiedene Werte κ dargestellt. Dabei werden die Elemente $\Delta F_{21,m}$, $\Delta F_{31,m}$ und $\Delta F_{32,m}$ in der Abbildung nicht angegeben, da sie den entsprechenden Elementen mit vertauschen Indizes sehr ähnlich sind. Die erwartete Ordnung des Fehlers ist damit bestätigt.

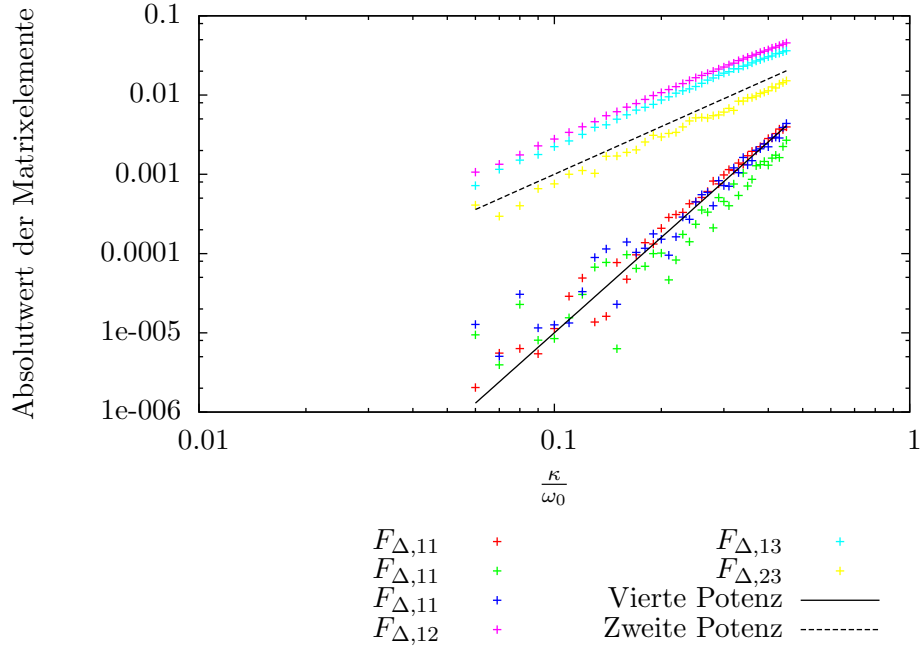


Abbildung 7.4: Die Elemente der Fehlermatrix ΔF_m in Abhängigkeit von der Kopplung κ

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Ausgehend von einem System aus einem Spin, der an ein klassisches fluktuierendes Feld koppelt, werden ein analytischer und ein numerische Ansatz verwendet, um die Dekohärenz im System zu untersuchen.

Die Magnus-Entwicklung ermöglicht eine analytische Berechnung der quantenmechanischen Erwartungswerte, wodurch der numerische Aufwand stark reduziert werden kann. Dadurch kann die Formel (5.10)

$$F_{ij}(t) = \overline{\cos(v(t))\delta_{ij}} + \overline{(1 - \cos(v(t)))\frac{v_i(t)v_j(t)}{(v(t))^2}} + \overline{\sin(v(t))\frac{\sum_k \epsilon_{ijk}v_k(t)}{v(t)}} \quad (8.1)$$

gefunden werden, wobei sich der Vektor $\mathbf{v}$ aus Produkten der Zufallsvariable $\eta(t)$ zusammensetzt. In erster Ordnung von κ ist der Vektor $\mathbf{v}$ gaußverteilt, womit die nötigen Mittelungen vereinfacht werden. Sie müssen durch numerische Integration oder Reihenberechnung durchgeführt werden. Dennoch ist die Methode wesentlich schneller als die numerische Simulation des Systems.

In Kapitel 5.6.2 wird gezeigt, dass die Korrelationen P_{22} und P_{33} in der Magnus-Entwicklung zerfallen, womit die Dekohärenz im System bestätigt wird. Allerdings tritt durch die verwendeten Näherungen ein Wiederanstieg der Korrelationen auf, was ein Artefakt der Methode ist. In Kapitel 6.6.2 kann gezeigt werden, dass die Korrelationen im System nach dem Zerfall nicht wieder ansteigen.

Die Magnus-Entwicklung ist nicht zur Beschreibung der der Korrelationen P_{12} , P_{13} , P_{21} und P_{31} geeignet, da die Abweichungen zwischen der analytischen Näherung in Kapitel 4.4.2 und der Magnus-Entwicklung in der selben Größenordnung wie die Korrelationen selbst liegen.

Die Frobeniusnormen n_F der Fehlermatrizen $\Delta \mathbf{F}$ in Kapitel 7 zeigen, dass der Fehler der Magnus-Entwicklung schnell ansteigt. Daher kann die Näherung nur für kurze Zeiten verwendet werden.

Eine systematische Verbesserung der Magnus-Entwicklung ist durch die Berechnung höhere Ordnung in der Kopplung κ zwischen Spin und Umgebung möglich. Allerdings wird bisher ausgenutzt, dass die erste Ordnung der Magnus-Entwicklung in κ eine effiziente Berechnung der Mittelungsintegrale ermöglicht. Für höhere Ordnungen geht diese

Effizienz verloren, da wieder bezüglich der Zufallsvariable $\eta(t)$ gemittelt werden muss, was nach Kapitel 3.2 zum Pfadintegralformalismus führt.

Möglicherweise ist die numerische Simulation der Gleichung (5.10) effizienter als die numerische Simulation des Zeitentwicklungsoperators $U_D(t)$. Denn in der Simulation müssen neben der Fluktuation $\eta(t)$ auch die quantenmechanischen Operatoren beschrieben werden.

Prinzipiell kann aber auch die numerische Simulation verwendet werden, um die Korrelationsmatrix $\mathbf{P}$ zu bestimmen. Der numerische Aufwand ist im Vergleich zum vollen Spin-Boson-Modell niedrig. Durch geeignete Implementationen kann die Effizienz weiter erhöht werden. Durch Parallelisierung kann zum Beispiel die Mittelung über die Fluktuationen beschleunigt werden oder die Zahl der Konfigurationen erhöht werden. Dadurch kann der statistische Fehler gesenkt werden, was die wesentliche Beschränkung in der Genauigkeit der Simulation darstellt.

Eine weitere Möglichkeit besteht in der numerischen Integration der reellen Differentialgleichung (4.37a) vom Vektor

$$\mathbf{s}(t) = U_D^\dagger(t) \boldsymbol{\sigma} U_D(t) \quad (8.2)$$

Dies ist möglicherweise effizienter als die numerische Simulation des Zeitentwicklungsoperators $U_D(t)$.

Für eine realistische Beschreibung kann das System um Felder erweitert werden, die an die Paulimatrizen σ_2 und σ_3 koppeln. Prinzipiell können dann weiterhin die vorgestellten Algorithmen verwendet werden. In Kapitel 5 wird an mehreren Stellen die explizite Form des Feldes ausgenutzt, zum Beispiel bei der Berechnung der Eigenwerte der Kovarianzmatrix $\mathbf{M}$. Diese Ergebnisse sind bei einer Erweiterung des Systems nicht mehr verwendbar. Die nötigen Anpassungen sollten aber nicht sehr aufwändig sein.

Neben einer veränderten Kopplung kann auch eine andere Autokorrelationsfunktion $g(t)$ verwendet werden, zum Beispiel eine Gaußfunktion. Für diesen Fall kann die Kovarianzmatrix $\mathbf{M}$ dann allerdings nicht mehr analytisch berechnet werden, wodurch der numerische Aufwand wieder steigt.

Anhang A

Konventionen und Formeln

A.1 Konventionen

In der Arbeit werden einige Konventionen genutzt. Diese Abkürzungen und Notationen werden im Folgenden definiert.

A.1.1 Wichtige Funktionen

Das Kroneker-Delta δ_{ij} ist durch

$$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

definiert. Der Ausdruck tritt insbesondere in der Spinalgebra auf.

In der Spinalgebra tritt ebenfalls das Levi-Civita-Symbol ϵ_{ijk} auf. Dieses ist durch

$$\epsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} 1, & \text{wenn } i,j,k \text{ zyklisch} \\ -1, & \text{wenn } i,j,k \text{ antizyklisch} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

definiert.

Für Rechnungen in Kapitel 5 wird die Doppelfakultät verwendet. Diese wird iterativ durch

$$n!! \equiv \begin{cases} n \cdot (n-2)!! & \text{für } n \geq 1 \\ 1 & \text{für } n = 0 \vee n = -1 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

definiert.

A.1.2 Konventionen in der lineare Algebra

Vektoren werden durch fettgedruckte Kleinbuchstaben dargestellt, zum Beispiel der Vektor $\mathbf{a}$. Elemente des Vektors werden durch den entsprechenden kursiven Buchstaben mit einem Index gekennzeichnet, also wird das zweite Element des Vektors $\mathbf{a}$ mit a_2 bezeichnet. Der Betrag, also die euklidische Norm, des Vektors wird mit dem kursiven Buchstaben ohne Index beschrieben, also ist a der Betrag des Vektors $\mathbf{a}$.

In der Arbeit werden das Skalarprodukt und das Vektorprodukt benötigt. Diese werden als

$$\mathbf{a}^T \mathbf{b} \equiv \sum_i a_i b_i \quad (\text{A.4a})$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} \equiv \sum_{i,j,k} (\epsilon_{ijk} a_i b_j) \mathbf{e}_k \quad (\text{A.4b})$$

geschrieben. Beim Vektorprodukt werden die Einheitsvektoren $\mathbf{e}_k$ verwendet.

Für Matrizen werden analog fettgedruckte Großbuchstaben verwendet, also zum Beispiel $\mathbf{A}$. Elemente einer Matrix werden durch Zeilen- und Spaltenindizes am entsprechenden kursiven Buchstaben gekennzeichnet, also wird mit A_{12} das Element in der ersten Zeile und der zweiten Spalte bezeichnet. Die Determinante einer Matrix $\mathbf{A}$ wird mit $|\mathbf{A}|$ dargestellt.

Als letztes wird die Notation

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = \sum_{i,j} (A_{ij} a_j) \mathbf{e}_i \quad (\text{A.5})$$

für ein Produkt aus Matrix und Vektor definiert.

A.1.3 Kommutatoren

Ein entscheidender Unterschied zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Mechanik ist der Operatorcharakter physikalischer Größen. Dies spiegelt sich in der (Nicht)Vertauschbarkeit wieder. Klassische Größen vertauschen immer. Für quantenmechanische Operatoren gilt dies im Allgemeinen nicht. Die Vertauschungsrelation wird durch den Kommutator beschrieben. Dieser ist für die Operatoren A und B als

$$[A, B] := AB - BA \quad (\text{A.6})$$

definiert. Offensichtlich ist ein verschwindender Kommutator gleichbedeutend mit vertauschenden Größen. Insbesondere vertauscht jeder Operator mit sich selbst.

Mit der Definition vom Kommutator kann der verschachtelte Kommutator

$$[A, B]_n := [A, [A, B]_{n-1}] \quad \text{mit} \quad [A, B]_0 = B \quad (\text{A.7})$$

definiert werden. Dies wird in der Magnus-Entwicklung in Gleichung (3.25) genutzt.

A.2 Formelsammlung

A.2.1 Mittelwert vom Kosinus

Bei den Berechnungen der Korrelationen muss der Kosinus gemittelt werden. Das Integral $I_c = \overline{\cos(\alpha x)}$ hat die allgemeine Form

$$I_c = \int_{\mathbb{R}} dx \cos(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\beta x^2}. \quad (\text{A.8a})$$

Mit der Euler-Formel und geeigneten Koordinatentransformationen folgt weiter

$$I_c = \int_{\mathbb{R}} dx e^{i\alpha x} e^{-\frac{1}{2}\beta x^2} \quad (\text{A.8b})$$

Zur Lösung des Integrales wird im Exponenten eine quadratischer Ergänzung durchgeführt. Das Ergebnis ist

$$I_c = e^{-\frac{\alpha^2}{2\beta}} \int_{\mathbb{R}} dx e^{-\frac{1}{2}\alpha(x - \frac{i\beta}{\alpha})^2} \quad (\text{A.8c})$$

Die verbliebene Integration ist ein komplexes Gaußintegral. Damit folgt für die gesuchte Größe

$$I_c = e^{-\frac{\alpha^2}{2\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \quad (\text{A.8d})$$

A.2.2 Partielle Integration in der Diagonalbasis

Für die Mittelung in der Diagonalbasis $\mathbf{r}$ in Kapitel 5.4.1 muss ein Gaußintegral des Types

$$f_{2n} = \int_{\mathbb{R}} dr r^{2n} e^{-\frac{r^2}{2\lambda}} \quad (\text{A.9a})$$

gelöst werden. Mit partieller Integration folgt

$$f_{2n} = \underbrace{-\lambda r^{2n-1} e^{-\frac{r^2}{2\lambda}}}_{=0} \Big|_{\mathbb{R}} + (2n-1) \lambda \int_{\mathbb{R}} dr r^{2n-2} e^{-\frac{r^2}{2\lambda}} = (2n-1) \lambda f_{2n-2}. \quad (\text{A.9b})$$

Durch sukzessive partielle Integration und Ausnutzung der Normierung $f_0 = 1$ kann schließlich der Zusammenhang

$$\int_{\mathbb{R}} dr r^{2n} e^{-\frac{r^2}{2\lambda}} = (2n-1)!! \lambda^n \quad (\text{A.9c})$$

berechnet werden.

A.2.3 Integralrelationen der trigonometrischen Funktionen

Zur Bestimmung der analytischen Näherung der Matrix $\mathbf{F}$ in Kapitel 4.4.2 und zur Berechnung der Kovarianzmatrix $\mathbf{M}$ in Kapitel 3.3 werden die zwei Integraltypen

$$f_c(t) = \int_0^t dt_1 \cos(\alpha t_1) e^{-\beta t_1} \quad (\text{A.10a})$$

$$f_s(t) = \int_0^t dt_1 \sin(\alpha t_1) e^{-\beta t_1} \quad (\text{A.10b})$$

mit $\beta > 0$ benötigt, die hier berechnet werden. Dafür wird das entsprechende Integral $f_e(t)$ der komplexen Exponentialfunktion

$$f_e(t) = \int_0^t dt_1 e^{i\alpha t_1} e^{-\beta t_1} = \int_0^t dt_1 e^{i\alpha t_1} e^{-\beta t_1} = \frac{i\alpha + \beta}{\alpha^2 + \beta^2} (1 - e^{i\alpha t - \beta t}) \quad (\text{A.11})$$

berechnet. Mit dem Satz von Euler folgt dann unmittelbar für die gesuchten Integrale

$$f_c(t) = \text{Re}[f_e(t)] = \frac{\alpha \sin(\alpha) e^{-\beta t} + \beta (1 - \cos(\alpha t) e^{-\beta t})}{\alpha^2 + \beta^2} \quad (\text{A.12a})$$

$$f_s(t) = \text{Im}[f_e(t)] = \frac{-\beta \sin(\alpha) e^{-\beta t} + \alpha (1 - \cos(\alpha t) e^{-\beta t})}{\alpha^2 + \beta^2}. \quad (\text{A.12b})$$

Anhang B

Formeln der Paulimatrizen

In der Masterarbeit treten häufiger einige Relationen der Paulimatrizen auf. Die Umformungen sollen hier allgemein vorgestellt werden.

Für die Paulimatrizen gilt die wesentliche Beziehung

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + \mathbf{i} \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (\text{B.1})$$

Sie ist für die folgenden Herleitungen grundlegend. Insbesondere gilt wegen $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$ (B.1)

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} + \mathbf{i} \sum_k (\epsilon_{ijk} + \epsilon_{jik}) \sigma_k = 2\delta_{ij} \quad (\text{B.2a})$$

$$\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = \mathbf{i} \sum_k (\epsilon_{ijk} - \epsilon_{jik}) \sigma_k = 2\mathbf{i} \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (\text{B.2b})$$

An vielen Stellen treten Skalarprodukte zwischen Vektoren aus dem $\mathbb{C}^3$ und Vektoroperatoren auf. Für die beiden Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ aus dem $\mathbb{C}^3$ kann mit Gleichung (B.1) die nützliche Relation

$$(\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{i,j} a_i b_j \sigma_i \sigma_j = \sum_i a_i b_i + \mathbf{i} \sum_{i,j,k} a_i b_j \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (\text{B.3a})$$

bestimmt werden. Der erste Term ist das Skalarprodukt von $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$, im zweiten tritt das Vektorprodukt auf. Damit gilt

$$(\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a}^T \mathbf{b} + \mathbf{i} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})^T \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{B.3b})$$

Mit der allgemeinen Formel können weitere wichtige Relationen berechnet werden. Für den Fall $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ gilt offenbar

$$(\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a}^T \mathbf{a} + \mathbf{i} (\mathbf{a} \times \mathbf{a})^T \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{a}^T \mathbf{a} = a^2 \quad (\text{B.4a})$$

Neben dem Produkt kann auch der Kommutator mit der allgemeinen Relation leicht berechnet werden. Das Vertauschen der Vektoren $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ in Gleichung (B.3b) bewirkt ein Vorzeichenwechsel vor dem zweiten Term. Für den Kommutator gilt somit

$$[\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}] = 2\mathbf{i} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})^T \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c}^T \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{B.5})$$

Neben den Kommutatoren ist auch die Relation

$$\boldsymbol{\sigma} (\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\sigma} = \sum_{i,j} a_j (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) \mathbf{e}_i = \sum_{i,j} a_j 2\delta_{ij} \mathbf{e}_i = 2\mathbf{a} \quad (\text{B.6})$$

nützlich. Sie tritt bei der Berechnung der Spinoperatoren $\boldsymbol{\sigma}(t)$ auf. Als letztes wird die Beziehung

$$(\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{a} = \sum_{i,j} a_i \sigma_i \sigma_j \mathbf{e}_j - \sum_j a_j \mathbf{e}_j = -\mathbf{i} \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} a_i \sigma_j \mathbf{e}_k = -\mathbf{i} \mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{B.7})$$

unter Ausnutzung von Gleichung (3.2) berechnet.

Im Zusammenhang mit den Zeitentwicklungsoperatoren tauchen komplexe Exponentialfunktionen auf. Diese können unter Ausnutzung der Algebra der Paulimatrizen zerlegt werden. Explizit ergibt sich

$$\exp(-\mathbf{i} \alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mathbf{i})^n}{n!} (\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})^n. \quad (\text{B.8a})$$

Die Summe wird nun in Summanden mit geradem und ungeradem Laufindex zerlegt, womit

$$\exp(-\mathbf{i} \alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(-1)^n}{(2n)!} (\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})^{2n} - \mathbf{i} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} (\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma})^{2n+1} \right] \quad (\text{B.8b})$$

gilt. Die Skalarprodukte werden mit Gleichung (B.3b) umgeformt. Durch geeignete Erweiterung im zweiten Summand folgt weiter

$$\exp(-\mathbf{i} \alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (\alpha a)^{2n} - \mathbf{i} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} (\alpha a)^{2n+1} \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a}. \quad (\text{B.8c})$$

Dies sind im Wesentlichen die Reihendarstellungen der Sinus- und Kosinusfunktion. Also kann die Exponentialfunktion umgeschrieben werden zu

$$\exp(-\mathbf{i} \alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) = \cos(\alpha a) \mathbb{1} - \mathbf{i} \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \quad (\text{B.8d})$$

Für die numerische Berechnung der zeitabhängigen Paulimatrizen wird die Relation

$$\mathrm{e}^{-\mathbf{i} \alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}} \mathrm{e}^{-\mathbf{i} \beta \mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}} = \left[\cos(\alpha a) - \mathbf{i} \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \right] \left[\cos(\beta b) - \mathbf{i} \sin(\beta b) \frac{\mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}}{b} \right] \quad (\text{B.9a})$$

benötigt. Durch Ausmultiplizieren und Ausnutzung von Gleichung (B.3b) erhält man

$$\begin{aligned} e^{-i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}} e^{-i\beta \mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \sin(\alpha a) \sin(\beta b) \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{ab} - i \sin(\alpha a) \cos(\beta b) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \\ &\quad - i \sin(\beta b) \cos(\alpha a) \frac{\mathbf{b}^T \boldsymbol{\sigma}}{b} - i \sin(\alpha a) \sin(\beta b) \frac{(\mathbf{a} \times \mathbf{b})^T \boldsymbol{\sigma}}{ab} \end{aligned} \quad (\text{B.9b})$$

Mit den vorgestellten Relationen kann die Zeitentwicklung für die Paulimatrizen berechnet werden, wenn sich der entsprechende Entwicklungsoperator $U(t)$ als Exponentialfunktion schreiben lässt. Dann gilt

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \exp(i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\sigma} \exp(-i\alpha \mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}) \quad (\text{B.10a})$$

$$= \left[\cos(\alpha a) + i \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \right] \boldsymbol{\sigma} \left[\cos(\alpha a) - i \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \right] \quad (\text{B.10b})$$

Mit Gleichung (B.6) kann dies umgeformt werden

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \left[\cos(\alpha a) + i \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \right]^2 \boldsymbol{\sigma} - 2i \sin(\alpha a) \left[\cos(\alpha a) + i \sin(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \right] \frac{\mathbf{a}}{a} \quad (\text{B.10c})$$

Die resultierenden Produkte können ausmultipliziert werden. Dabei treten ein Quadrat wie in Gleichung (B.4a) und ein Term wie in Gleichung (3.5) auf, allerdings mit $\mathbf{a} = \mathbf{b}$. Mit den entsprechenden Beziehungen folgt dann

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(t) &= [\cos(\alpha a) - \sin(\alpha a)] \boldsymbol{\sigma} + 2 \sin^2(\alpha a) \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a^2} \mathbf{a} - \\ &\quad - 2i \sin(\alpha a) \cos(\alpha a) \left(\frac{\mathbf{a}}{a} - \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a} \boldsymbol{\sigma} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.10d})$$

Mit Additionstheoremen für die trigonometrischen Funktionen und Gleichung (B.7) kann daraus schließlich die Beziehung

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \cos(2\alpha a) \boldsymbol{\sigma} - \sin(2\alpha a) \frac{\mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma}}{a} + [1 - \cos(2\alpha a)] \frac{\mathbf{a}^T \boldsymbol{\sigma}}{a^2} \mathbf{a} \quad (\text{B.10e})$$

berechnet werden. Diese ist wesentlich für die Berechnung der Spinkorrelationen.

Anhang C

Analytischen Näherungslösung

Für ein übersichtliches Ergebnis werden die Abkürzungen

$$A := \frac{1}{\omega_0^2 + \Omega^2} \quad (\text{C.1a})$$

$$g_c(t) := \cos(\omega_0 t) e^{-\Omega t} \quad (\text{C.1b})$$

$$g_s(t) := \sin(\omega_0 t) e^{-\Omega t} \quad (\text{C.1c})$$

$$f_1(t) := \kappa^2 A \left[\frac{1 - \cos(2\omega_0 t)}{4} + \frac{\Omega t}{2} + \frac{\Omega \sin(2\omega_0 t)}{2\omega_0} - A\Omega (\omega_0 g_s(t) + \Omega - \Omega g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1d})$$

$$f_2(t) := \frac{1}{\Omega} \left[\frac{\sin(\omega_0 t)}{\omega_0} - A (\omega_0 g_s(t) + \Omega - \Omega g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1e})$$

$$f_3(t) := \kappa^2 A \left[e^{-\Omega t} - \cos(\omega_0 t) + \frac{\Omega \sin(\omega_0 t)}{\omega_0} \right] \quad (\text{C.1f})$$

$$f_4(t) := \kappa^2 A \left[\frac{\Omega t}{2} - \frac{\Omega \sin(2\omega_0 t)}{4\omega_0} + \frac{1 - \cos(2\omega_0 t)}{4} + A\omega_0 (-\Omega g_s(t) + \omega_0 - \omega_0 g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1g})$$

$$f_5(t) := \kappa^2 \frac{1 - \cos(\omega_0 t)}{\Omega \omega_0} - \kappa^2 A \left[-g_s(t) + \frac{\omega_0}{\Omega} (1 - g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1h})$$

$$f_6(t) := \kappa^2 A \left[\frac{\Omega}{\omega_0} (1 - \cos(\omega_0 t)) + \frac{\omega_0}{\Omega} (1 - e^{-\Omega t}) - \sin(\omega_0 t) \right] \quad (\text{C.1i})$$

$$f_7(t) := \kappa^2 A \left[-\frac{\omega_0 t}{2} - \frac{\sin(2\omega_0 t)}{4} + \frac{\Omega}{\omega_0} \frac{1 - \cos(2\omega_0 t)}{4} + A\omega_0 (\omega_0 g_s(t) + \Omega - \Omega g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1j})$$

$$f_8(t) := \kappa^2 A \left[\frac{\omega_0 t}{2} - \frac{\sin(2\omega_0 t)}{4} + \frac{\Omega}{\omega_0} \frac{1 - \cos(2\omega_0 t)}{4} + A\Omega (\Omega g_s(t) - \omega_0 + \omega_0 g_c(t)) \right] \quad (\text{C.1k})$$

$$f_9(t) := \kappa^2 \frac{t}{\Omega} + \kappa^2 \frac{e^{-\Omega t} - 1}{\Omega^2} \quad (\text{C.1l})$$

verwendet. Damit kann die Näherungslösung in Kapitel 4.4.2 mit den eingeführten Abkürzungen und der Konvention $c = \cos(\alpha)$ und $s = \sin(\alpha)$ angegeben werden. Für die Elemente der Matrix $\mathbf{F}_a(t)$ in Gleichung (4.41) gilt

$$F_{a,11}(t) = 1 - s^2 c^2 (f_1 - f_2 - f_3 + f_9) - s^2 f_4 \quad (\text{C.2a})$$

$$F_{a,12}(t) = s c^2 f_5 + s^3 f_8 \quad (\text{C.2b})$$

$$F_{a,13}(t) = s^3 c (f_1 - f_3) + s c^3 (f_2 - f_9) \quad (\text{C.2c})$$

$$F_{a,21}(t) = c^2 s f_6 + s^3 f_7 \quad (\text{C.2d})$$

$$F_{a,22}(t) = 1 - s^4 f_1 - s^2 c^2 (f_2 + f_3) + c^4 f_9 \quad (\text{C.2e})$$

$$F_{a,23}(t) = -s^2 c (f_6 - f_7) \quad (\text{C.2f})$$

$$F_{a,31}(t) = s^3 c (f_1 - f_2) + s c^3 (f_3 - f_9) \quad (\text{C.2g})$$

$$F_{a,32}(t) = -s^2 c (f_5 - f_8) \quad (\text{C.2h})$$

$$F_{a,33}(t) = 1 - s^4 f_1 - s^2 c^2 (f_2 + f_3) - s^2 f_4 - c^4 f_9 \quad (\text{C.2i})$$

wobei auf die explizite Angabe der Zeitabhängigkeit der Abkürzungen verzichtet wird.

Anhang D

Hilfsintegrale

D.1 Relationen zwischen den Hilfsintegralen

In Kapitel 5.3 werden Hilfsintegrale zur Bestimmung der Kovariantmatrix angegeben, die durch Anwendung von Additionstheoremen der trigonometrischen Funktionen bei der Berechnung der Integrale auftreten. Neben den vier angegebenen Hilfsintegralen können zusätzlich die beiden Integrale

$$h_4(t) = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \sin[\omega(t_1 + t_2)] \quad (\text{D.1a})$$

$$h_5(t) = \kappa^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 g(|t_1 - t_2|) \sin(\omega t_1) \quad (\text{D.1b})$$

gefunden werden. Diese werden in Kapitel 5.3 nicht angegeben, da sie sich aus den Integralen h_1 beziehungsweise h_3 durch Multiplikation eines Tangens berechnen lassen. In den verwendeten Zeitkoordinaten kann dies nicht unmittelbar erkannt werden, daher wird eine geeignete Koordinatentransformation

$$t_1 + t_2 = \tau_1 \quad t_1 - t_2 = \tau_2 \quad (\text{D.2a})$$

$$dt_1 dt_2 = \frac{1}{2} d\tau_1 d\tau_2 \quad (\text{D.2b})$$

$$\tau_1 \in [0, t], \tau_2 \in [-\tau_1, \tau_1] \vee \tau_1 \in [t, 2t], \tau_2 \in [-2t + \tau_1, 2t - \tau_1] \quad (\text{D.2c})$$

durchgeführt. Damit folgt für die Hilfsintegrale

$$G(t) = 2 \int_0^t \gamma(\tau_1) d\tau_1 \quad (\text{D.3a})$$

$$h_1(t) = (1 + \cos(2\omega_0 t)) \int_0^t \cos(\omega_0 \tau_1) \gamma(\tau_1) d\tau_1 + \sin(2\omega_0 t) \int_0^t \sin(\omega_0 \tau_1) \gamma(\tau_1) d\tau_1 \quad (\text{D.3b})$$

$$h_2(t) = 2 \int_0^t \gamma'(\tau_1) d\tau_1 \quad (\text{D.3c})$$

$$h_3(t) = (1 + \cos(\omega_0 t)) \int_0^t \cos\left(\frac{\omega_0}{2} \tau_1\right) \gamma''(\tau_1) d\tau_1 + \sin(\omega_0 t) \int_0^t \sin\left(\frac{\omega_0}{2} \tau_1\right) \gamma''(\tau_1) d\tau_1 \quad (\text{D.3d})$$

$$h_4(t) = (1 - \cos(2\omega_0 t)) \int_0^t \sin(\omega_0 \tau_1) \gamma(\tau_1) d\tau_1 + \sin(2\omega_0 t) \int_0^t \cos(\omega_0 \tau_1) \gamma(\tau_1) d\tau_1 \quad (\text{D.3e})$$

$$h_5(t) = (1 - \cos(\omega_0 t)) \int_0^t \sin\left(\frac{\omega_0}{2} \tau_1\right) \gamma''(\tau_1) d\tau_1 + \sin(\omega_0 t) \int_0^t \cos\left(\frac{\omega_0}{2} \tau_1\right) \gamma''(\tau_1) d\tau_1. \quad (\text{D.3f})$$

Dabei werden die Abkürzungen

$$\gamma(t) := \int_0^t g(\tau_2) d\tau_2 \quad (\text{D.4a})$$

$$\gamma'(t) := \int_0^t \cos(\omega_0 \tau_2) g(\tau_2) d\tau_2 \quad (\text{D.4b})$$

$$\gamma''(t) := \int_0^t \cos\left(\frac{\omega_0}{2} \tau_2\right) g(\tau_2) d\tau_2 \quad (\text{D.4c})$$

verwendet. Die Umformungen sind für alle geraden Funktionen $g(t)$ korrekt. Aus diesen Formeln können nun unmittelbar die Relationen

$$h_4(t) = h_1(t) \tan(\omega_0 t), \quad (\text{D.5a})$$

$$h_5(t) = h_3(t) \tan\left(\frac{\omega_0}{2} t\right) \quad (\text{D.5b})$$

abgelesen werden.

D.2 Integrale für exponentiell zerfallende Autokorrelationsfunktionen

In Kapitel 5 werden Hilfsintegrale definiert, welche bei der Berechnung der Korrelationsmatrix $\mathbf{M}$ auftreten. Für die Autokorrelationsfunktion $g(t) = e^{-\Omega|t|}$ können diese Integrale explizit berechnet werden. Hierfür werden die Integrale (A.12a) und (A.12b)

mit geeigneten Werten α und β verwendet. Die Ergebnisse sind

$$G(t) = 2 \frac{\kappa^2}{\Omega} \left(t - \frac{1}{\Omega} (1 - e^{-\Omega t}) \right) \quad (\text{D.6a})$$

$$h_1(t) = \frac{\kappa^2 \Omega}{\omega_0 (\omega_0^2 + \Omega^2)} \sin(2\omega_0 t) + \frac{2\kappa^2}{\omega_0^2 + \Omega^2} (\cos(\omega_0 t) e^{-\Omega t} - \cos^2(\omega_0 t)) \quad (\text{D.6b})$$

$$h_2(t) = \frac{2\kappa^2}{\omega_0^2 + \Omega^2} \left[\Omega t + \frac{1}{\omega_0^2 + \Omega^2} ((\omega_0^2 - \Omega^2) (1 - \cos(\omega_0 t) e^{-\Omega t}) - 2\omega_0 \Omega \sin(\omega_0 t) e^{-\Omega t}) \right] \quad (\text{D.6c})$$

$$\begin{aligned} h_3(t) = & \frac{\kappa^2}{\omega_0^2 + 4\Omega^2} \left(8 \frac{\Omega}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) + (1 - e^{-\Omega t}) \left(\frac{\omega_0}{\Omega} \sin(\omega_0 t) - 2(1 + \cos(\omega_0 t)) \right) \right) + \\ & + \frac{\kappa^2}{(\omega_0^2 + \Omega^2)(\omega_0^2 + 4\Omega^2)} ((\omega_0^2 - 2\Omega^2) (1 + \cos(\omega_0 t)) (1 - e^{-\Omega t}) - 3\omega_0 \Omega \sin(\omega_0 t) (1 + e^{-\Omega t})) \end{aligned} \quad (\text{D.6d})$$

Quellenverzeichnis

- [1] DiVINCENZO, David P.: Quantum Computation. In: *Science* 270 (1995), Nr. 5234, 255-261. <http://dx.doi.org/10.1126/science.270.5234.255>. – DOI 10.1126/science.270.5234.255
- [2] UHRIG, Götz S.: Keeping a Quantum Bit Alive by Optimized π -Pulse Sequences. In: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), Mar, 100504. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.100504>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.98.100504
- [3] UHRIG, Götz S.: Exact results on dynamical decoupling by π pulses in quantum information processes. In: *New Journal of Physics* 10 (2008), Nr. 8, 083024. <http://stacks.iop.org/1367-2630/10/i=8/a=083024>
- [4] LEGGETT, A. J. ; CHAKRAVARTY, S. ; DORSEY, A. T. ; FISHER, Matthew P. A. ; GARG, Anupam ; ZWERGER, W.: Dynamics of the dissipative two-state system. In: *Rev. Mod. Phys.* 59 (1987), Jan, 1–85. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.59.1>. – DOI 10.1103/RevModPhys.59.1
- [5] SHAO, Jiushu ; ZERBE, Christine ; HÄNGGI, Peter: Suppression of quantum coherence: Noise effect. In: *Chemical Physics* 235 (1998), Nr. 1–3, 81 - 92. [http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104\(98\)00074-3](http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104(98)00074-3). – DOI [http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104\(98\)00074-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104(98)00074-3). – ISSN 0301-0104
- [6] LEVITT, M. H.: *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. Jon Wiley and Sons, Inc., 2005
- [7] BULLA, R. ; COSTI, T. A. ; PRUSCHKE, T.: Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. In: *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008), Apr, 395–450. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.80.395>. – DOI 10.1103/RevModPhys.80.395
- [8] STANEK, D. ; RAAS, C. ; UHRIG, G. S.: Dynamics and decoherence in the central spin model in the low-field limit. In: *ArXiv e-prints* (2013), August
- [9] WITZEL, W. M. ; YOUNG, K. ; DAS SARMA, S.: Converting a real quantum bath to an effective classical noise. In: *ArXiv e-prints* (2013), Juli

- [10] BLANES, S. ; CASAS, F. ; OTEO, J.A. ; ROS, J.: The Magnus expansion and some of its applications. In: *Physics Reports* 470 (2009), Nr. 5–6, 151 - 238. <http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2008.11.001>. – DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2008.11.001>. – ISSN 0370–1573
- [11] VOJTA, Matthias: Numerical renormalization group for the sub-Ohmic spin-boson model: A conspiracy of errors. In: *Phys. Rev. B* 85 (2012), Mar, 115113. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115113>. – DOI 10.1103/PhysRevB.85.115113
- [12] LANGE, G. de ; WANGI, Z. H. ; RISTÈ, D. ; DOBROVITSKI, V. V. ; HANSON, R.: Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. In: *Science* 330 (2010), Oct, 60–63. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1192739>. – DOI 10.1126/science.1192739
- [13] MÜNSTER, G.: *Quantentheorie*. De Gruyter, 2009
- [14] SCHWABL, F.: *Quantenmechanik: Eine Einführung*. Springer, 2007
- [15] MILLER, K. S.: *Multidimensional Gaussian Distribution*. Jon Wiley and Sons, Inc., 1964
- [16] MAGNUS, W.: On the exponential solution of differential equations for a linear operator. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics* 7 (1954), Nr. 4, 649–673. <http://dx.doi.org/10.1002/cpa.3160070404>. – DOI 10.1002/cpa.3160070404. – ISSN 1097–0312
- [17] ALVERMANN, A ; FEHSKE, H ; LITTLEWOOD, P B.: Numerical time propagation of quantum systems in radiation fields. In: *New Journal of Physics* 14 (2012), Nr. 10, 105008. <http://stacks.iop.org/1367-2630/14/i=10/a=105008>
- [18] FOX, Ronald F. ; GATLAND, Ian R. ; ROY, Rajarshi ; VEMURI, Gautam: Fast, accurate algorithm for numerical simulation of exponentially correlated colored noise. In: *Phys. Rev. A* 38 (1988), Dec, 5938–5940. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.38.5938>. – DOI 10.1103/PhysRevA.38.5938
- [19] BOX, G. E. P. ; MULLER, M. E.: A Note on the Generation of Random Normal Deviates. In: *Annals of Mathematical Statistics* 29 (1958), S. 610–611

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Professor Götz Uhrig für die ausgezeichnete Betreuung bei meiner Masterarbeit und für die Vergabe des interessanten Themas bedanken. Viele technische und inhaltliche Probleme konnten mit seiner Unterstützung gelöst werden.

Desweiteren möchte ich Professor Joachim Stolze für Ratschläge im Seminar und die Übernahme des Zweitgutachtens danken.

Daniel Stanek hat mir wesentlich bei Verständnisproblemen geholfen und Teile der Arbeit korrekturgelesen, wofür ich ihm sehr Dankbar bin.

Darüber hinaus bedanke ich mich bei Nils Drescher, der in vielen Unterhaltungen in der Mensa guten Ratschläge geben konnte.

Der gesamten Arbeitsgruppe danke ich für die freundliche Atmosphäre und die angenehme Zeit.

Abschließend will ich meiner Familie für ihre Unterstützung und Geduld mit mir danken, insbesondere meiner Freundin Susanne Fischer.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Masterarbeit mit dem Titel "Dekohärenz im allgemeinen Spin-Boson-Modell im klassischen Limes" 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