

Reversibilitätsuntersuchung in Quantensystemen mit Hilfe von exakter Diagonalisierung

Bachelorarbeit aus der Physik

Vorgelegt von

Georg Thomas Christian Axmann

1. Oktober 2018

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. Martin Eckstein

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Vielteilchen Quantendynamik	5
2.1	Einteilchen-Quantenmechanik	5
2.2	Vielteilchen-Quantenmechanik	7
2.3	Zweite Quantisierung	8
2.4	Allgemeine Vielteilchenmodelle	10
2.5	Vereinfachte Modelle	12
3	Numerische Realisierung	14
3.1	Allgemeine Vorbemerkungen	14
3.2	Numerischer Hilbertraum	14
3.3	Numerische Operatoren	16
3.4	Numerische Zeitentwicklung	18
4	Analyse der Genauigkeit	22
4.1	Beispielrechnung	22
4.2	Optimierung der numerischen Parameter	24
5	Untersuchung zur Irreversibilität	27
5.1	Irreversibilität	27
5.2	Der Lyapunov-Exponent	28
5.3	Reversibilitätstest im Quantensystem	28
5.4	Störoperation	30
5.5	Resultate	33
6	Fazit und Diskussion	38
7	Danksagung	40

1 Einleitung

Die chaotische Charakteristik der Dynamik von Systemen vieler Freiheitsgrade ist die bestimmende Eigenschaft, die es in solchen Systemen erlaubt anzunehmen, dass keiner der mikroskopischen Zustände eine ausgezeichnete Rolle einnimmt. Nur durch diese Annahme wird ein solches System dem thermodynamischen oder statistischen Formalismus zugänglich. Während die Irreversibilität für klassisch beschriebene Systeme bereits seit geraumer Zeit gut verstanden ist, bildet die adäquate Beschreibung für allgemeine, quantentheoretisch beschriebene Vielteilchensysteme einen Gegenstand der Forschung. Zentrum der Diskussion in dieser Arbeit soll daher ein im Nov. 2017 publizierter Vorschlag (s. [1]) für einen Reversibilitätstest der Dynamik von Vielteilchensystemen sein.

Um das vorgeschlagene Protokoll besser verstehen zu können ist es hilfreich, ein klassisches Analogon vor Augen zu haben: Sei ein System vieler Freiheitsgrade ohne weitere Einmischung über ein gewisses zeitliches Intervall entwickelt worden. Würden dann die Impulse aller Teilchen instantan durch ihr Negatives ersetzt, ohne die Teilchen an ihren jeweiligen Stellen zu verrücken, so müsste sich das System auf dem gleichen Weg durch den Phasenraum wieder in die Ausgangssituation zurück begeben — dies würde durch die als zeitlich reversibel beschriebene mikroskopische Dynamik so erzwungen werden. Bei einer gleichzeitigen Störung der Orte würde sich im Falle einer chaotischen Dynamik eine exponentielle Abweichung ergeben. Unabhängig davon, wie gut die Orte erhalten sind, kann der ursprüngliche Zustand nicht mehr hergestellt werden: Die Dynamik wird als irreversibel bezeichnet.

Für die quantentheoretische Interpretation steht die Untersuchung des makroskopisch bemerkbaren Unterschiedes zwischen einem generischen Vielteilchensystem, beschrieben durch einen gewissen Anfangszustand $|\psi\rangle$, sowie dem gleichen System beschrieben durch den Zustand $U(-t)\hat{P}U(t)|\psi\rangle$ im Mittelpunkt. Der erwähnte Zustand beschreibt das System nach gestörter Umkehrung der Dynamik. Es ergeben sich zwei besonders wichtigen Fragen:

- Wie kann der makroskopische Unterschied adäquat untersucht werden?
- Wie kann das System gestört werden, ohne, dass Informationsgehalt über den Anfangszustand weder in trivialer Weise erhalten, noch vernichtet wird?

Grundlegend für die genauere Betrachtung des Protokolls ist der geeignete vieleilchentheoretische Hintergrund, der in Abschnitt 2 diskutiert wird. Daran schließt sich in Abschnitt 3 die Diskussion der numerischen Realisierung eines Algorithmus zur zeitlichen Entwicklung eines quantentheoretischen, mikroskopischen Zustandes an; die Genauigkeit der entsprechenden Implementierung wird in Abschnitt 4 besprochen. Nachdem also in diesen Teilen der adäquate Hintergrund präsentiert wurde, kann in Abschnitt 5 die Diskussion des Protokolls und der damit erzielten Ergebnisse dargestellt werden. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf den möglichen Störoperationen. Darauf folgend schließt Abschnitt 6 mit einem Résumé der Arbeit und einem Ausblick auf im Zusammenhang offen gebliebene Themen.

2 Vielteilchen Quantendynamik

2.1 Einteilchen-Quantenmechanik

Die Modellbildung der quantenmechanischen Beschreibung der Interaktion eines Teilchen mit seiner (nicht genauer modellierten) Umgebung wird in der sog. Kanonischen Quantisierung durch die Postulate der Quantenmechanik begründet. Untersuchungsgegenstände sind der mit dem betrachteten System assoziierte Hilbertraumⁱ, Zustandsraum genannt, weil seine Elemente den Zustand des quantenmechanischen Systems enkodieren (i. d. R. wird er mit \mathcal{H} notiert) und die auf diesem Raum definierten selbstadjungierten Operatoren, die Observablen. Für eine genauere Betrachtung der quantenmechanischen Postulate und deren mathematische Formulierung mit Hilfe der Dirac'schen Bra-Ket-Schreibweise siehe zum Beispiel [2]. Im Weiteren folgt die Betrachtung der für die Dynamik identischer Teilchen wichtigsten Resultate.

Um den Hilbertraum beschreiben zu können, ist ein sog. vollständiger Satz kommutierender Observabler (v. S. k. O.) von Nöten. Das ist eine Sammlung von Observablen $(\hat{A}_i)_{i \in \mathcal{I}}$, für die der Ausdruck $[A_l, A_m] := \hat{A}_l \hat{A}_m - \hat{A}_m \hat{A}_l$ ⁱⁱ paarweise den Nulloperator ergibt und von welcher gleichzeitig gefordert wird, dass die Angabe eines Eigenwertes pro Observable im v. S. k. O. eindeutig einen Zustand des Zustandsraums charakterisiert, welche für jede Observable im v. S. k. O. einen Eigenvektor zum korrespondierenden Eigenwert darstellt. Ist ein v. S. k. O. gegeben, kann daraus sogleich eine Basis des Hilbertraums entwickelt werden. Oft gewählte vollständige Sätze kommutierender Observabler sind:

- $\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_z$: die Komponenten des Ortsoperators, das Betragsquadrat des Spins und die z -Projektion des Spins.
- $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$: die Impulskomponenten statt der Ortskomponenten.
- $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$: statt der Komponenten von Orts- bzw. Impulsoperator die Energie, das Betragsquadrat des Bahndrehimpulses und die z -Projektion desselben.

ⁱDefinition: ein komplexer Skalarproduktraum, der mit Bezug auf die vom Skalarprodukt induzierte Metrik (topologisch) vollständig ist.

ⁱⁱder sog. Kommutator

In der Dynamik identischer Teilchen ist das Betragsquadrat des Spins nicht von Belang, da es für alle Teilchen gleich ist (sonst könnte man sie Anhand ihres Spins unterscheiden). Man kann daher zunächst den ersten v. S. k. O. der Angegebenen wählen und den Eigenwert sowie die Observable zum Betragsquadrat des Spins fortlassen. Als Resultat kann die Gesamtkonfiguration eines Teilchens durch die Angaben des Ortes und der z -Spin-Projektion gegeben werden.

Im Weiteren werden für die Gesamtkonfiguration eines Teilchens ein Buchstabe vom Ende des Alphabets, mit einem Pfeil und ggf. einem numerischen Index gekennzeichnet, für die räumliche Konfiguration ein Buchstabe aus der Reihe r, s, \dots ebenfalls mit einem Pfeil und ggf. dem gleichen numerischem Index versehen und für die Spinkonfiguration ein kleiner, griechischer Buchstabe $\sigma, \tau \dots$ verwendet. Beispiele für dadurch gekennzeichnete Zustände sind $|\vec{y}\rangle = |\vec{s} \tau\rangle$ oder $|\vec{x}_1\rangle = |\vec{r}_1 \sigma_1\rangle$. Eine beliebige Konfiguration einer beliebigen Anzahl von Teilchen $\vec{x}_1 \dots \vec{x}_N$ (auch von null Teilchen) wird mit einem großen Buchstaben C in Frakturschrift, also mit $\mathfrak{C}, \mathfrak{C}_1, \mathfrak{C}_2, \dots$ notiert. Wird ein Zustand durch ein Symbol wie $|\phi\rangle$ oder $|\psi\rangle$ gekennzeichnet, so ist ein beliebiges, normiertes Element des Hilbertraumes gemeint.

Das Äquivalent der Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik, der Hamiltonoperator (meist \hat{H} notiert), der auch die der Energie zugeordnete Observable ist, ist von besonderer Bedeutung. Der Hamiltonoperator ist der Schlüssel zur Quantendynamik:

Postulat: Beschreibt ein Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ den quantenmechanischen Zustand eines Systems mit beschreibendem Hamiltonoperator \hat{H} zu einem Zeitpunkt t , so ist der Zustand des Systems zum Zeitpunkt s durch das Folgende gegeben:

$$\mathrm{T} \exp \left(-i \int_t^s \hat{H}(\xi) d\xi \right) |\psi\rangle =: U(t, s) |\psi\rangle$$

Hier steht $\mathrm{T} \exp$ symbolisch für das sog. zeitgeordnete Integral:

$$\dots = -i \sum_{n=0}^{\infty} \int_t^s d\tau_1 \int_t^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_t^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \circ \dots \circ \hat{H}(\tau_n)$$

Der so definierte unitäre Operator U wird Zeitentwicklungsoperator genannt. Eine äquivalente Formulierung der Quantendynamik bietet die sog. Schrödingergleichung: Die Funktion $s \mapsto |\psi\rangle(s) \equiv U(t, s) |\mathfrak{C}\rangle$ ist eine Lösung der Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial x} |\phi\rangle(x) = \hat{H} |\phi\rangle(x)$$

mit der Anfangsbedingung $|\phi\rangle(t) = |\psi\rangle$, wobei $|\psi\rangle, s, t$ gewählt seien wie bei der Formulierung des Postulats.

2.2 Vielteilchen-Quantenmechanik

Die Beschreibung von Mehrteilchen-Systemen beruht auf der Erweiterung der Postulate der Quantenmechanik um ein entsprechendes Postulat (s. [2, Kap. 2]) für die Behandlung von zusammengesetzten Systemen:

Postulat: Der mit einem zusammengesetzten System assoziierte Hilbertraum ist das Tensorprodukt der mit den jeweiligen Teilsystemen assoziierten Hilberträume.

Die Operatoren auf diesem Raum ergeben sich dabei durch Tensorprodukte der Form $\hat{A}_{(1)} = \hat{A} \otimes \mathbb{1}$ bzw. $\hat{B}_{(2)} = \mathbb{1} \otimes \hat{B}$, wobei \hat{A} und \hat{B} Operatoren auf den mit dem ersten bzw. zweiten Teilsystem assoziierten Hilberträumen sind.

Allerdings ergeben sich konzeptuelle Schwierigkeiten, wenn Systeme nicht unterscheidbarer Teilchen betrachtet werden. Es ließe sich nämlich keine Familie vom Teilsystemen finden, sodass jedem Teilsystem ein Teilchen zugewiesen werden könnte und die Gesamtheit der Teilsysteme dem Gesamtsystem entspräche. Wäre das möglich könnte darüber hinaus der mit dem Gesamtsystem assoziierte Hilbertraum als Tensorprodukt der mit den Teilsystemen assoziierten Hilberträume gefunden werden. Die Zuweisung von Teilsystemen zu Teilchen ließe aber den Rückschluss vom Teilsystem auf ein damit verbundenes Teilchen zu, womit durch die Unterscheidung von Teilsystemen auch die Unterscheidung von Teilchen ermöglicht wäre — was der Annahme von Ununterscheidbarkeit widerspricht.

Wie aber lassen sich nun Systeme nicht unterscheidbarer Teilchen betrachten? Wir betrachten den Fall zweier Teilchen. Des Weiteren notieren wir $|n_1 n_2\rangle$ für einen Zustand, bei dem sich das erste Teilchen durch die (Sammlung von) Quantenzahlen n_1 beschreiben lässt und das Zweite durch n_2 . Die Phänomenologie schreibt vor, dass sich der Zustand $|n_1 n_2\rangle$ physikalisch nicht vom Zustand $|n_2 n_1\rangle$ unterscheiden lassen darf, da dieser durch Austauschen der Teilchen entsteht.

Es gilt also $|n_1 n_2\rangle = z |n_2 n_1\rangle$ $z \in \mathbb{C} : |z| = 1$, die Zustände dürfen sich noch um einen Phasenfaktor unterscheiden, wobei $z = \pm 1$ als empirisches Resultat angenommen werden kann.

Dieses Resultat generalisiert sich direkt für Systeme mit mehr als zwei Teilchen. Man notiere $|n_1 \dots n_N\rangle$ für den Zustand in dem von N Teilchen das j -te durch die Sammlung von Quantenzahlen n_j (z. B. $\vec{r} \sigma$) beschrieben wird. Insgesamt gilt dann bei einer Permutation π der Teilchen, dass

$$|n_1 \dots n_N\rangle = (\pm)^{\text{ord}(\pi)} |n_{\pi(1)} \dots n_{\pi(N)}\rangle^{\text{iii}}$$

mit einem der Vorzeichen für alle Zustände der Form $|n_1 \dots n_N\rangle$. Das erlaubt es, die beschreibbaren Systeme von nicht unterscheidbaren Teilchen in zwei Gruppen einzuteilen:

- Bosonen, für die das obere Zeichen gilt. Die bosonischen Zustände sind vollständig symmetrisch unter Austausch von Teilchen.
- Fermionen, für die das untere Zeichen gilt. Die fermionischen Zustände sind vollständig antisymmetrisch unter Austausch von Teilchen.

Der mit einem Vielteilchensystem zu assoziierende Hilbertraum kann mit Ausnutzung dieser Resultate gefunden werden. Er wird Fockraum genannt und für Bosonen mit \mathcal{F}_+ notiert, für Fermionen mit \mathcal{F}_- . Um ihn zu finden, muss man die äußere direkte Summe der jeweiligen n -Teilchen-Räume bilden und topologisch vervollständigen. Ein n -Teilchen-Raum ist dabei der symmetrische bzw. antisymmetrische Tensor-Unterraum des $\mathcal{H}^{\otimes n}$. Die hier gegebene Herleitung des Resultats ist in [3] zu finden. Auch der nächste Abschnitt nimmt Bezug auf diese Quelle.

2.3 Zweite Quantisierung

Durch die zweite Quantisierung wird das Problem, dass der assoziierte Hilbertraum nicht als Tensorprodukt der Einteilchenräume gefunden werden kann, umgangen. Der Raum wird hier nicht mehr durch die Zustände in ihm charakterisiert sondern viel mehr durch die Operatoren, die auf ihm wirken sollen.

Vakuum Es gibt einen ausgezeichneten Zustand im Fockraum, der als Vakuum bezeichnet und mit $|0\rangle$ notiert wird. Man erhält ihn als normierten Zustand des Null-Teilchen-Raums ($\cong \mathbb{C}$). Da dieser eindimensional ist, lässt sich der Vakuum-Zustand also direkt identifizieren. Mit Hilfe dieses Zustands lassen sich die Feldoperatoren, nämlich der sog. Erzeugungsoperator $\psi^\dagger(\vec{x})$ und der dazu adjungierte Vernichtungsoperator, durch ihre Wirkung auf dem Fockraum erklären.

ⁱⁱⁱMit $\text{ord}(\pi)$ wurde hier die Ordnung der Permutation bezeichnet.

Feldoperatoren Man definiert den Erzeugungsoperator durch

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\vec{x}) |0\rangle &:= |\vec{x}\rangle \\ \psi^\dagger(\vec{x}) |\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n\rangle &:= |\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n \vec{x}\rangle.\end{aligned}$$

Je nach Teilchenart definiert man so die fermionischen Feldoperatoren $\psi_-^{(\dagger)}(\vec{x})$ auf dem fermionischen Fockraum \mathcal{F}_- oder die bosonischen Feldoperatoren $\psi_+^{(\dagger)}(\vec{x})$ auf dem bosonischen Fockraum \mathcal{F}_+ . Da für eine beliebige Konfiguration beliebig vieler Teilchen jeweils $|\mathfrak{C}\vec{x}\vec{y}\rangle = \pm |\mathfrak{C}\vec{y}\vec{x}\rangle$ gelten muss, ersieht man leicht die charakteristischen Vertauschungsrelationen. Es gilt zunächst

$$\begin{aligned}|\mathfrak{C}\vec{x}\vec{y}\rangle &= \psi^\dagger(\vec{y})\psi^\dagger(\vec{x})|\mathfrak{C}\rangle \\ &= \pm |\mathfrak{C}\vec{y}\vec{x}\rangle \\ &= \pm \psi^\dagger(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y})|\mathfrak{C}\rangle,\end{aligned}$$

was gleichbedeutend mit $0 = \psi^\dagger(\vec{y})\psi^\dagger(\vec{x})|\mathfrak{C}\rangle \mp \psi^\dagger(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y})|\mathfrak{C}\rangle$ ist. Vereinfacht:

$$0 = \begin{cases} [\psi^\dagger(\vec{y}), \psi^\dagger(\vec{x})] & \text{für Bosonen,} \\ \{\psi^\dagger(\vec{y}), \psi^\dagger(\vec{x})\} & \text{für Fermionen.} \end{cases}$$

Die Vertauschungsrelation für die Fermionen wurde dabei mit Hilfe des Antikommutators $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ formuliert. Durch Adjungieren erhält man sofort, dass

$$\left. \begin{array}{ll} \text{für Bosonen} & [\psi(\vec{y}), \psi(\vec{x})] \\ \text{für Fermionen} & \{\psi(\vec{y}), \psi(\vec{x})\} \end{array} \right\} = 0 \quad \text{und}$$

gilt. Eine Relation zwischen Vernichtungsoperator und Erzeugungsoperator kann aus der Wirkung des Vernichtungsoperators auf dem Hilbertraum hergeleitet werden. Im Einteilchen-Zustandsraum ergibt sich das Folgende:

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle &= \langle 0 | \psi(\vec{x}) | \vec{y} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \\ \Rightarrow \quad \psi(\vec{x}) | \vec{y} \rangle &= \delta(\vec{x} - \vec{y}) | 0 \rangle.\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich leicht die folgende, allgemeinere Formel:

$$\psi(\vec{x}) |\vec{y}_1 \dots \vec{y}_N\rangle = \sum_{k=1}^N (\pm)^{N+k} \delta(\vec{x} - \vec{y}_k) |\vec{y}_1 \dots \overset{\vee}{\vec{y}_k} \dots \vec{y}_N\rangle,$$

wobei der Akzent die Auslassung^{iv} der entsprechenden Sammlung von Quantenzahlen andeuten soll. Mit dieser Formel lässt sich nun ein Ausdruck für den (Anti-)Kommutator von Erzeuger und Vernichter angeben:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y})|\vec{w}_1 \dots \vec{w}_N\rangle &= \psi(\vec{x})|\vec{w}_1 \dots \vec{w}_N\vec{y}\rangle \\
&= \delta(\vec{x} - \vec{y}) + \\
&\quad \sum_{k=1}^N \delta(\vec{x} - \vec{w}_k)(\pm)^{(N+1)+k}|\vec{w}_1 \dots \overset{\vee}{\vec{w}_k} \dots \vec{w}_N\vec{y}\rangle \\
&= (\delta(\vec{x} - \vec{y}) \pm \psi^\dagger(\vec{y})\psi(\vec{x}))|\vec{w}_1 \dots \vec{w}_N\rangle.
\end{aligned}$$

Umstellen und Auflösen liefert

$$(\psi(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y}) \mp \psi^\dagger(\vec{y})\psi(\vec{x}))|\vec{w}_1 \dots \vec{w}_N\rangle = \delta(\vec{x} - \vec{y})|\vec{w}_1 \dots \vec{w}_N\rangle, \text{ sodass schließlich}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{für Bosonen} \quad [\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] \\ \text{und für Fermionen} \quad \{\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})\} \end{array} \right\} = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \text{ gilt.}$$

Weil sich mit dem sog. Teilchenzahloperator $\hat{n}(\vec{x}) := \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$ die Vertauschungsrelationen $[\hat{n}(\vec{x}), \psi(\vec{y})] = -\delta(\vec{x} - \vec{y})\psi(\vec{y})$ bzw. $[\hat{n}(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] = \delta(\vec{x} - \vec{y})\psi^\dagger(\vec{y})$ ganz unabhängig von der Teilchenspezies ergeben, könnte man alternativ auch den umgekehrten Weg gehen und die Operatoralgebra über die angegebenen Vertauschungsrelationen definieren.

2.4 Allgemeine Vielteilchenmodelle

Die Untersuchung der Reversibilität soll in allgemeinen Vielteilchenmodellen geschehen und es muss geklärt werden, von welcher Form ein geeigneter Modellhamiltonian ist. Einfache Modelle ergeben sich direkt durch Kombinationen der Feldoperatoren $\psi^{(\dagger)}(\vec{x})$. Im vorliegenden Fall wird der Feldoperator diskretisiert, um das Modell numerischen Methoden zugänglich zu machen; genauer gesagt wird aus einer Ort-/Spinkonfiguration $\vec{x} = (\vec{r}, \sigma)$ eines Teilchens die Nummer eines Gitterplatzes, auf dem das Teilchen sitzen kann. Ein in Berechnungen oft verwendetes Gitter findet sich in Kap. 5, Abb. 5.2, dort wird näher auf das Modell eingegangen. In Kapitel 3.2 wird beschrieben, wie durch die Diskretisierung die Charakterisierung des geeigneten Hilbertraums gelingen kann.

^{iv} $|\vec{y}_1 \dots \overset{\vee}{\vec{y}_k} \dots \vec{y}_N\rangle \equiv |\vec{y}_1 \dots \vec{y}_{k-1}\vec{y}_{k+1} \dots \vec{y}_N\rangle = \psi^\dagger(\vec{y}_N) \dots \psi^\dagger(\vec{y}_1)|0\rangle$

Ein Modell für die freie Propagation der Teilchen, beruhend auf einem Operator \hat{h} , der diese für ein einzelnes Teilchen auf dem Einteilchenraum beschreibt, lautet

$$\hat{H}_0 = \int d\vec{x} d\vec{y} \psi^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | \hat{h} | \vec{y} \rangle \psi(\vec{y}).$$

Die Verifikation als sinnvolle Formulierung in zweiter Quantisierung gelingt durch die Einführung der Operatoren $d_n^{(\dagger)}$, die^v durch

$$|n\rangle = d_n^\dagger |0\rangle = \mathbb{1} |n\rangle = \int d\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | n \rangle = \left(\int d\vec{x} \phi_n(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}) \right) |0\rangle$$

motiviert sind. Für die Operatoren $d_n^{(\dagger)}$ können wiederum Vertauschungsrelationen hergeleitet werden, wie sie für die Feldoperatoren gelten. Deshalb kann im Falle von d_n^\dagger von einem Operator gesprochen werden, der ein Teilchen mit Quantenzahl n ^{vi} erzeugt und im Falle von d_n eines vernichtet. Man schreibt in der Folge auch wieder

$$|n_1 \dots n_N\rangle \quad \text{für} \quad d_{n_N}^\dagger \dots d_{n_1}^\dagger |0\rangle$$

wobei wieder dadurch, dass die Operatoren direkt auf dem Fockraum definiert werden, automatisch die für die jeweilige Teilchenspezies charakteristische Austauschsymmetrie beachtet wird. Diese Operatoren erlauben die Vereinfachung des obigen Modells. Es gilt

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_n \int d\vec{x} d\vec{y} \psi^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | \hat{h} | n \rangle \langle n | \vec{y} \rangle \psi(\vec{y}) \\ &= \sum_n \varepsilon_n \int d\vec{x} \langle \vec{x} | n \rangle \psi^\dagger(\vec{x}) \int d\vec{y} \langle n | \vec{y} \rangle \psi(\vec{y}) \\ &=: \sum_n \varepsilon_n d_n^\dagger d_n =: \sum_n \varepsilon_n \hat{n}_n, \end{aligned}$$

wobei der Dichteoperator \hat{n}_n einen selbstadjungierten Operator darstellt. Die der Dichte der Teilchen mit Quantenzahl n zugeordnete Observable wird durch ihn dargestellt. Die Wirkung des Operators \hat{H}_0 stimmt mit der Wirkung der geeigneten Vielteilchen-Verallgemeinerung des Operators \hat{h} überein, welche durch $\sum_{N=1}^\infty \mathfrak{H}_N$ gegeben ist, wobei

$$\mathfrak{H}_N = \overbrace{\underbrace{\hat{h} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}}_{N \text{ Faktoren}} + \dots + \underbrace{\mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \hat{h}}_{N \text{ Faktoren}}}^{N \text{ Summanden}},$$

die geeignete Verallgemeinerung des Operators \hat{h} auf den N -Teilchen-Raum darstellt.

^vunter Verwendung der Funktionen $\phi_n(\vec{x}) = \langle \vec{x} | n \rangle$

^{vi}bsw. hat das Teilchen die Energie ε_n

Für den Teil des Hamiltonians, welcher die Interaktion zwischen Teilchen beschreibt, kann von einem Modell der Form

$$\int d\vec{x} d\vec{y} \hat{n}(\vec{x}) \hat{n}(\vec{y}) v(\vec{x}, \vec{y}) - \int d\vec{x} v(\vec{x}, \vec{x}) \hat{n}(\vec{x})$$

ausgegangen werden. Das zweite Integral verhindert die Wechselwirkung eines Teilchens mit sich selbst. Dieses Integral kann ebenso auch über zwei Konfigurationen ausgeführt werden, wenn eine Delta-Distribution verwendet wird. Unter Ausnutzung der Vertauschungsrelation $\psi(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y}) \mp \psi^\dagger(\vec{y})\psi(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{y})$ kann der Integrand vereinfacht werden. Wir berechnen unter Vereinfachung der Notation, $\psi_{\vec{x}} \equiv \psi(\vec{x})$ und $\hat{n}_{\vec{x}} \equiv \hat{n}(\vec{x})$:

$$\begin{aligned} \hat{n}_{\vec{x}} \hat{n}_{\vec{y}} - \delta(\vec{x} - \vec{y}) &= \psi_{\vec{x}}^\dagger \psi_{\vec{x}} \psi_{\vec{y}}^\dagger \psi_{\vec{y}} - \delta(\vec{x} - \vec{y}) \hat{n}_{\vec{x}} \\ &= \psi_{\vec{x}}^\dagger \left(\delta(\vec{x} - \vec{y}) \pm \psi_{\vec{y}}^\dagger \psi_{\vec{x}} \right) \psi_{\vec{y}} - \psi_{\vec{x}}^\dagger \delta(\vec{x} - \vec{y}) \psi_{\vec{x}} \\ &= \pm \psi_{\vec{x}}^\dagger \psi_{\vec{y}}^\dagger \left(\pm \psi_{\vec{y}} \psi_{\vec{x}} \right) \\ &= \psi_{\vec{x}}^\dagger \psi_{\vec{y}}^\dagger \psi_{\vec{y}} \psi_{\vec{x}} \end{aligned}$$

Wenn man auch bei dem Teil, der die Interaktion der Teilchen beschreibt, zu den Operatoren $d^{(\dagger)}$ übergeht, ergibt sich der gesamte allgemeine Vielteilchenhamiltonian schließlich zur Summe

$$\sum_{mn} h_{mn} \hat{d}_m^\dagger \hat{d}_n + \sum_{ijkl} v_{ijkl} \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_j^\dagger \hat{d}_k \hat{d}_l ,$$

in der v_{ijkl} die sog. Coulomb-Integrale

$$\int d\vec{x} d\vec{y} \phi_i^*(\vec{x}) \phi_j^*(\vec{y}) v(\vec{x}, \vec{y}) \phi_k(\vec{y}) \phi_l(\vec{x})$$

und die Zahlen $h_{mn} = \langle m | \hat{h} | n \rangle$ die gewohnten Matrixelemente des Operators \hat{h} bilden. Um das Modell der numerischen Behandlung zugänglich zu machen, müssen Vereinfachungen getroffen werden.

2.5 Vereinfachte Modelle

In der Diskretisierung geht die Beziehung $d_n = \int d\vec{x} \phi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x})$ in eine Matrixgleichung $d_n = \sum_k A_{nk}^\dagger C_k$ über. Unter Verwendung der diskretisierten Feldoperatoren $C_k^{(\dagger)}$ ergibt sich ein Modell, mit welchem einfache Vielteilchenmodelle, in denen nicht näher auf materialspezifische Eigenschaften eingegangen wird, untersucht werden können. Die in dieser Arbeit untersuchten Modelle sind spinlose Fermionen

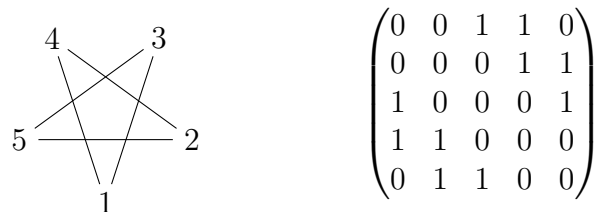


Abbildung 2.1: Ein Pentagramm und seine Adjazenzmatrix, stellvertretend für die Gitter, mit welchen in dieser Arbeit die Dynamik von Vielteilchensystemen diskutiert wird.

und sog. *Hard-Core-Bosonen*, i. e. Bosonen, die nicht denselben Quantenzustand einnehmen können, aber dennoch die symmetrische Austauschsymmetrie aufweisen. Durch das Modell können auch eindimensionale Spin-Ketten beschrieben werden. Die Wechselwirkung der Teilchen untereinander sowie Komponenten des Hamiltonian, die eine Veränderung der Teilchenzahl bewirken können, werden in der Arbeit allerdings nicht betrachtet. Das Modell für die freie Propagation ist

$$\sum_{ij} h_{ij} C_i^\dagger C_j,$$

mit gewissen Koeffizienten h_{ij} , die sich aus den Koeffizienten $\langle m | \hat{h} | n \rangle$ des allgemeinen Modells durch den Basiswechsel $A^{(H)}$ von der Energiebasis $|n\rangle$ ergeben würden. Durch die Wahl der Koeffizienten wird festgelegt, zwischen welchen Plätzen die Teilchen tunneln dürfen. Wenn die Koeffizienten als Einträge in der Adjazenzmatrix des Gitters aufgefasst werden, kann die Wechselwirkung kompakt durch eine Skizze charakterisiert werden. Beispielhaft dafür ist in Abb. 2.1 die Skizze eines Pentagramms mit Adjazenzmatrix dargestellt.

3 Numerische Realisierung

3.1 Allgemeine Vorbemerkungen

Bevor näher auf die verwendeten Algorithmen für die numerische Realisierung der Zeitentwicklung eingegangen werden kann^{vii}, ist es hilfreich, die Gegenstände der Untersuchung kennen zu lernen bzw. zu präzisieren, wie die Wirkung eines Modellhamiltonians auf dem adäquaten Hilbertraum beschrieben werden kann.

Form der Problemstellung Untersucht wird ein Gitter mit einer zeitlich unveränderlichen Platzanzahl bzw. unveränderlichen Stegen (Möglichkeiten der Teilchen, von Platz zu Platz zu Tunneln). Das System wird mit einer festen Anzahl von Teilchen der selben Spezies angefüllt. Dabei gilt für Fermionen wie gewohnt die in den vorderen Teilen beschriebene antisymmetrische Austauschsymmetrie (das Pauli-Prinzip). Für Bosonen gilt ein Ähnliches: zwar gilt die charakteristische symmetrische Austauschsymmetrie, allerdings werden die Bosonen als sog. *Hard-Core*-Bosonen modelliert, wodurch es ihnen unmöglich wird, gleiche Konfigurationen zu erhalten. Die wichtige Folge ist, dass beide Spezies den gleichen assoziierten Hilbertraum haben.

3.2 Numerischer Hilbertraum

Durch die genannte Problemstellung ergibt sich sogleich eine natürliche Wahl für die Feldoperatoren. Ein passender Erzeuger C_k^\dagger wird mit Nennung einer Platznummer k einen Zustand präparieren, in dem ein Teilchen auf dem Platz der genannten Nummer positioniert ist und es könnte

$$C_k^\dagger |0\rangle = |0 \dots 0 \underset{\substack{\uparrow \\ k}}{1} 0 \dots 0\rangle$$

^{vii}Die technische Diskussion der numerischen Implementierung soll hier nicht erfolgen, jedoch kann der Code unter [4] eingesehen werden.

notiert werden, wobei die Konfiguration für jeden der N Plätze die Besetzungszahl angibt. Auf dem Platz mit Nummer j sitzen also δ_{kj} viele Teilchen. Die Wirkung des Erzeugungsoperators auf einen beliebigen durch eine solche Besetzungszahl-Konfiguration angebbaren Zustand ergibt sich aus den Vertauschungsrelationen:

Für Fermionen gilt

$$\begin{aligned} C_k^\dagger |n_1 \dots n_N\rangle &= C_k^\dagger C_N^{\dagger n_N} \dots C_1^{\dagger n_1} |0\rangle \\ &= (-1)^{\sum_{i=k}^N n_i} C_N^{\dagger n_N} \dots C_k^{\dagger n_k+1} \dots C_1^{\dagger n_1} |0\rangle, \end{aligned}$$

was verschwindet, falls $n_k = 1$, da $C_k^{\dagger 2} = 0$. Sonst ergibt sich der Zustand, der der Konfiguration $n_1 \dots n_N$ zugeordnet ist mit einem Vorzeichen, welches mit der Anzahl an Vertauschungen zwischen benachbarten Erzeugern korrespondiert, die nötig sind, um die richtige Reihenfolge herzustellen. Für Bosonen ergibt sich auf ähnlichem Weg ein vergleichbares Ergebnis, wobei zusätzlich wegen der geforderten *Hard-Core* Eigenschaft beachtet werden muss, dass wiederum $C_{k,+}^{\dagger 2} = 0$ gilt.

Die Wirkung des Vernichtungsoperators kann ebenso schnell gefunden werden:

$$\begin{aligned} \left. \begin{array}{l} [C_l, C_k^\dagger] \\ \{C_l, C_k^\dagger\} \end{array} \right\} &= C_l C_k^\dagger \mp C_k^\dagger C_l = \delta_{kl} \\ \Leftrightarrow C_l C_k^\dagger &= \delta_{kl} \cdot \mathbb{1} \pm C_k^\dagger C_l \end{aligned}$$

Es ist z.B. $C_l |1\rangle = (\delta_{1l} \pm C_1^\dagger C_l) |0\rangle$, wobei der rechte Summand verschwindet (im Vakuum gibt es keine Teilchen, die vernichtet werden könnten). Die Wirkung auf einen Zustand der Form $|n_1 \dots 1 \dots n_N\rangle$ (mit $n_l = 1$) ergibt sich analog wie oben:

$$\begin{aligned} C_l |n_1 \dots n_N\rangle &= C_l C_N^{\dagger n_N} \dots C_1^{\dagger n_1} |0\rangle \\ &= (\pm C_N^\dagger)^{n_N} \dots (\pm C_{l+1}^\dagger)^{n_{l+1}} (\mathbb{1} \pm C_l^\dagger C_l) C_{l-1}^\dagger \dots C_1^\dagger |0\rangle \\ &= (\pm)^{\sum_{i=l+1}^N n_i} |n_1 \dots \underset{\substack{\uparrow \\ l}}{0} \dots n_N\rangle \end{aligned}$$

Zusammenfassend kann die Wirkung von Erzeuger und Vernichter auf ein Basiselement $|\mathfrak{C}\rangle = |n_1 \dots n_N\rangle$ durch

$$C_k^\dagger |\mathfrak{C}\rangle = (\pm)^{\sum_{i>k} n_i} (1 - n_k) |\dots 1 \dots\rangle \quad C_l |\mathfrak{C}\rangle = (\pm)^{\sum_{i>k} n_i} n_l |\dots 0 \dots\rangle$$

angegeben werden, wobei das jeweils obere Vorzeichen für *Hard-Core*-Bosonen und das Untere für spinlose Fermionen gilt. Da die Besetzungszahlen wegen der Einschränkung $C_{n,\pm}^{\dagger 2} = 0$ nur die Werte 0 und 1 annehmen können, liegt es nahe, die Basiszustände in der numerischen Behandlung durch Binärzahlen zu verwirklichen. Beispielhaft für die numerische Verwirklichung der Wirkung von Operatoren folgt die Definition des Vernichtungsoperators in der Sprache C++.

```

1 #define SITES ... //Anzahl der Plätze
2 int C(unsigned &Conf, unsigned l, bool ferm) {
3     if (! (Conf & (1<<l)) ) return 0; // kein Teilchen zu vernichten
4     Conf |= ~(1<<l); int s=0; // neuer Zustand
5     // summiere und gebe richtiges Vorzeichen zurück
6     for (unsigned i=l+1; i < SITES; i++) s+= (Conf & (1<<i)) > 0;
7     return 1 - 2*(s%2)*ferm;
8 }

```

Da das Bild eines Zustandes der Konfiguration **Conf** unter dem Operator C_l nur bis auf das Vorzeichen wieder in eine Konfiguration enkodiert werden kann (nämlich in die durch Bitoperationen entstehende Konfiguration in Zeile 4), muss das Vorzeichen separat zurückgegeben werden. Die Wirkung auf einen beliebigen Zustand ergibt sich durch formale Anwendung des Operators:

$$C_l |\phi\rangle = C_l \sum_i \phi(\mathfrak{c}_i) |\mathfrak{c}_i\rangle = \sum_{\mathfrak{c}} \phi(\mathfrak{c}) \underbrace{C_l |\mathfrak{c}\rangle}_{\text{bekannt}}.$$

In der numerischen Praxis werden die Zustandsvektoren durch eine Instanz der C++-vector<complex<double>>-Klasse realisiert. Dabei steht die i -te Komponente für den Wert $\phi(\mathfrak{c}_i)$ wie in der Summe oben. $(\mathfrak{c}_i)_{i=1}^{\dim(\mathcal{H})}$ ist dabei eine fest gewählte Nummerierung der Basiskonfigurationen. In der numerischen Realisierung wurde die zahlenmäßige Entsprechung der Binärdarstellung der Konfiguration in der absteigenden Reihenfolge gewählt, bsw. für zwei Teilchen auf drei Plätzen: $i = 1 \Leftrightarrow \mathfrak{c} = 110$, $i = 2 \Leftrightarrow \mathfrak{c} = 101$, $i = 3 \Leftrightarrow \mathfrak{c} = 011$.

3.3 Numerische Operatoren

Für die numerische Behandlung des Problems genügt die Kenntnis der Wirkung weniger Operatoren. Diese sind:

- Der Modellhamiltonian \hat{H} ,
- der Störungsoperator \hat{P} und
- der Operator \hat{O} zur Teilchenzahl im zu Beginn voll besetzten Subsystem.

Der Operator \hat{O} – an späterer Stelle (Abschnitt 5.1) mehr – dient dazu, den physikalisch relevanten Unterschied im makroskopischen Zustand des Systems festzustellen. Anwendung des Operators \hat{P} soll den mikroskopischen Zustand verändern, ohne eine große Änderung des makroskopischen Zustandes hervorzurufen. Er wird in Abschnitt 5.4 näher diskutiert. Für die gegenwärtige Diskussion ist nur von Belang, dass beide Operatoren in der Basis der Besetzungszahlen bereits in diagonalen Form sind. Daher sind sie recht leicht zu implementieren. Beispielsweise genügt für die Darstellung von $\hat{O} = \otimes_{i \in S} \hat{n}_i$ bereits eine `for`-Schleife und die einmalige Berechnung der Koeffizienten, siehe dazu den folgenden Pseudo-Code:

```

1 double O(const vector<complex> &v) {
2     static vector<uint8_t> coeff(v.size(),0);
3     static bool first=true;
4     if (first) { first=false;
5         for (/*Basiskonfigurationen: unsigned b*/) {
6             int count=0;
7             for (/*Subsystem-indices: unsigned i*/) {
8                 if (b & (1<<i)) count++; }
9             coeff[/*Basisindex der Konfiguration b*/]=count;
10        } }
11    complex ret;
12    for (int i=0;i<v.size();i++){
13        ret += v[i]*coeff[i]
14            * complex_conjugate(v[i]); }
15    return real(ret);
16 }

```

Die Wirkung des Modellhamiltonians ist schwerer zu beschreiben, da die Basiszustände nun keine Eigenzustände des Operators sind: Jeder Summand $h_{ij}C_i^\dagger C_j$ verändert für $i \neq j$ die Konfiguration. Es ist aber möglich, die Wirkung durch eine Matrixmultiplikation der Matrix

$$\mathcal{H}_{ij} = \langle \mathfrak{C}_i | \hat{H} | \mathfrak{C}_j \rangle$$

mit einem Komponentenvektor $(\phi(\mathfrak{C}_1), \dots, \phi(\mathfrak{C}_{\dim(\mathcal{H})}))^\top$ darzustellen. Diese Matrix muss zu jedem Zeitpunkt reproduzierbar sein. In dieser Implementierung wurde sie deshalb nach einmaliger Erzeugung im Speicher gehalten.

Die Dimension des problemspezifischen Hilbertraums ergibt sich aus der Anzahl der Basiskonfigurationen, also dem Binomialkoeffizienten von Platzanzahl m und Teilchenzahl n $\binom{m}{n}$. Bei den betrachteten Problemen war stets $m = 2n$. Bereits bei kleinen Teilchenzahlen hat man es mit nicht zu vernachlässigendem Speicherbedarf zu tun: Wenn für die Matrixelemente eine Präzision von 64 bit zur Verfügung gestellt wird, ergibt sich bei zehn Teilchen auf zwanzig Plätzen ein Bedarf von

$\binom{20}{10}^2 \cdot 64 \text{ bit} = 273.1 \text{ GB}$ ^{viii} für die Matrix, mit der \hat{H} dargestellt wird. Für physikalisch interessante Probleme kann also die Matrix i.d.R. nicht vollständig gespeichert werden.

Um diesem Problem entgegen zu wirken, kann ausgenutzt werden, dass wegen der Eigenschaften des gewählten Operators in der Besetzungszahlbasis viele der Koeffizienten verschwinden. Ein Speicherformat für diese sog. dünn-besetzten Matrizen ist das Format CRS (*compressed row storage*), das sich besonders durch eine einfach parallelisierbare^{ix} Matrix-Vektor-Multiplikation von rechts auszeichnet. Die entsprechende Definition des C++-struct für den Hamilton-Operator war dabei Teil der Eigenimplementierung. Um die zeitliche Entwicklung eines Zustandes verfolgen zu können, muss mit Hilfe des Hamiltonoperators der sog. Zeitentwicklungsoperator berechnet werden.

3.4 Numerische Zeitentwicklung

Im ersten Abschnitt wurde die Dynamik von Quantensystemen durch ein zeitgeordnetes Integral ^x gegeben (2.1). Tatsächlich ist ein solches nicht notwendig, wenn der Hamiltonoperator keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist. Der Zeitentwicklungsoperator ergibt sich so zu

$$U(t, s) = \exp\left(-i\hat{H}(s - t)\right).$$

Die numerische Berechnung des Zustandes zum Zeitpunkt s erfordert also die Berechnung des Matrixproduktes zwischen dem Matrixexponential des Hamiltonoperators (multipliziert mit $(t - s) \cdot i$) und dem Vektor, der den Zustand zum Zeitpunkt t wiedergibt. Da die Berechnung des Matrixexponentials aus Ressourcengründen für den Modellhamiltonian nicht direkt erfolgen kann, muss das Ergebnis genähert werden, indem die Differenz $t - s$ klein gehalten wird, sodass der Hamiltonian auf einem geeigneten Unterraum approximiert werden kann.

Der Lanczos-Algorithmus stellt eine passende Methode zur Näherung des Hamiltonoperators auf einem Unterraum zur Verfügung, die obendrein eine gute Konvergenz des nachfolgend ausgewerteten Matrixexponentials bedingt. Dieser Algorithmus

^{viii}vgl.: ein Heimcomputer verfügt im Normalfall über etwa 16 GB sog. „random-access memory“ (RAM), also Speicher, in dem vom Programm zur Laufzeit benötigte Daten gespeichert werden.

^{ix}Das Einbinden des C++-Headers `omp.h` in die Definition der Matrix-Klasse erlaubt es, die Multiplikationen des Vektors mit den verschiedenen Zeilen der Matrix in verschiedenen Threads gleichzeitig ausführen zu lassen.

^x $U(t, s) := T \exp\left(-i \int_t^s \hat{H}(\xi) d\xi\right)$

nutzt außerdem direkt aus, dass die Matrix-Elemente im CRS-Format gespeichert werden, da für die numerische Realisierung nur eine Abbildung eines Vektors auf das Matrixprodukt mit der zu teildiagonalisierenden Matrix erforderlich ist.

3.4.1 Krylow-Räume

Der Krylow-Raum zu einem Operator \hat{A} , zur Ordnung \mathcal{L} über dem Vektor $|\phi\rangle$, notiert $\mathcal{K}_{\hat{A}}^{\mathcal{L}}[|\phi\rangle]$, ist der Span:

$$\text{span}_{\mathbb{C}}\left(\left\{|\phi\rangle, \hat{A}|\phi\rangle, \dots, \hat{A}^{\mathcal{L}-1}|\phi\rangle\right\}\right).$$

Er spielt eine wichtige Rolle bei der Betrachtung vieler numerischer Verfahren zur Lösung höherdimensionaler linearer Probleme, so auch beim hier definierten Lanczos-Algorithmus.

Man kann leicht ein Kriterium angeben, wann die Dimension des Krylow-Raums mit seiner Ordnung übereinstimmt: Sei der Zustand von der Form

$$|\phi\rangle = \sum_{\varepsilon_n} a_n |n\rangle, \text{ mit } \exists m \geq \mathcal{L} \text{ sodass } \forall n \leq m : a_n \neq 0,$$

wobei sich die Summe über paarweise verschiedene Eigenwerte des Operators erstrecken möge und $|n\rangle$ Eigenzustände seien. Dann gilt:

$$\hat{A}^k |\phi\rangle = \sum_{\varepsilon_n} \varepsilon_n^k a_n |n\rangle.$$

Damit die Menge der Zustände $|\phi\rangle, \hat{A}|\phi\rangle, \dots, \hat{A}^{\mathcal{L}-1}|\phi\rangle$ linear unabhängig, ist muss die Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & \varepsilon_1 & \dots & \varepsilon_1^{\mathcal{L}-1} \\ 1 & \varepsilon_2 & \dots & \varepsilon_2^{\mathcal{L}-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \varepsilon_{\mathcal{L}} & \dots & \varepsilon_{\mathcal{L}}^{\mathcal{L}-1} \end{pmatrix}$$

invertierbar und deshalb die Zahlen $\varepsilon_1 \dots \varepsilon_{\mathcal{L}}$ paarweise verschieden sein. Dieses Kriterium ergibt sich aus der Gestalt der Matrix, da diese die Form einer Vandermonde-Matrix annimmt.

3.4.2 Das Lanczos-Verfahren

Um den Hamiltonoperator auf diesem Unterraum zu approximieren, könnte man erneut auf die Berechnung der Matrixelemente bezüglich der neuen (Unterraum-) Basis zurückgreifen. Das ist allerdings wenig handhabbar und braucht obendrein

nicht unbedingt eine gute Konvergenz der numerischen Routine zur Berechnung des Matrixexponentials zu bedingen. Eine viel bessere Konvergenz wird erzielt, wenn der Operator in eine tridiagonale Form gebracht wird, was automatisch erreicht ist, wenn man die Basis einem Gram-Schmidt'schen Orthonormalisierungsverfahren unterzieht.

Für eine nähere Betrachtung werden ein paar Bezeichnungen eingeführt. Sei mit $|n\rangle$ der n -te orthonormalisierte Basiszustand bezeichnet, wobei $|1\rangle = |\phi\rangle$ der zu entwickelnde Zustand sein soll. Dieser Zustand $|n\rangle$ ist nach der Gram-Schmidt-Methode durch

$$|n+1\rangle = \frac{1}{b_{n+1}} \left(\hat{A} |n\rangle - \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| \hat{A} |n\rangle \right)$$

gegeben, wobei mit b_{n+1} der Betrag der Klammer bezeichnet wird. Weiterhin sei der Erwartungswert der Observablen \hat{A} im n -ten orthonormalisierten Basiszustand mit a_n benannt (es gilt $a_n = \langle v_n | \hat{A} | v_n \rangle$). Es soll nun durch vollständige Induktion gezeigt werden, dass das Folgende gilt:

$$\hat{A} |n\rangle = b_n |n-1\rangle + a_n |n\rangle + b_{n+1} |n+1\rangle.$$

Beweis: Es gelte formal $|0\rangle = 0$. Aus den Definitionen folgt direkt der Induktionsanfang:

$$b_2 |2\rangle = \hat{A} |1\rangle - |1\rangle \langle 1| \hat{A} |1\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A} |1\rangle = b_2 |2\rangle + a_1 |1\rangle + b_1 |0\rangle.$$

Für den Induktionsschritt gelte zunächst als Induktionsvoraussetzung, dass für ein bestimmtes $n \in \mathbb{N}$ die Gleichung

$$\hat{A} |i\rangle = b_i |i-1\rangle + a_i |i\rangle + b_{i+1} |i+1\rangle$$

für alle Zahlen $i \in \{1 \dots n-1\}$ erfüllt ist. Es wird berechnet:

$$\begin{aligned} b_{n+1} |n+1\rangle &= \hat{A} |n\rangle - \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| \hat{A} |n\rangle \\ &= \hat{A} |n\rangle - a_n |n\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} |i\rangle \otimes \left(\langle n | \left(b_i |i-1\rangle + a_i |i\rangle + b_{i+1} |i+1\rangle \right) \right)^* \\ &= \hat{A} |n\rangle - a_n |n\rangle - b_{n-1} |n-1\rangle \end{aligned}$$

Durch Umstellen ergibt sich der Schritt auf $n+1$. □

Das Resultat zeigt, dass der Hamiltonoperator im Falle, dass $\dim(\mathcal{K}_{\hat{H}}^{\mathcal{L}}[|\phi\rangle]) = \mathcal{L}$ durch die $\mathcal{L} \times \mathcal{L}$ -Matrix

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{\mathcal{L}-1} & b_{\mathcal{L}} \\ 0 & \dots & 0 & b_{\mathcal{L}} & a_{\mathcal{L}} \end{pmatrix}$$

angenähert werden kann. Das hier aufgewendete Verfahren lässt die sonst gern implementierten Schritte für das Auffinden der extremalen Eigenwerte und deren Eigenvektoren aus. Ziel ist ausschließlich, den Hamiltonoperator in eine tridiagonale Form zu bringen, um ihn so auf dem kleineren Unterraum zu approximieren. Indem aus den Schritten

- $|\psi\rangle \rightarrow \hat{H} |\psi\rangle = |\tilde{\psi}\rangle$,
- $|\tilde{\psi}\rangle \rightarrow |n\rangle$,
- Speichern der dabei entstehenden a_n und b_{n+1} ,

eine iterative Prozedur geschaffen wird, kann die Größe des Unterraums im Voraus festgelegt werden.

Eine Näherung des Zeitentwicklungsoperators $U(t, s)$ entsteht aus dieser Matrix durch Multiplikation mit $i(t - s)$ und Auswerten des Matrixexponentials. Für dieses wurde eine Routine der C++-Mathematik-Bibliothek `<unsupported/Eigen/MatrixFunctions>` verwendet. Damit gelingt die approximierte Entwicklung über ein Intervall $\Delta = s - t$. Um die Zeitentwicklungsoperation für ein größeres Intervall zu nähern, wird die Entwicklung in n sukzessive Teilentwicklungen über das kürzere Intervall $\delta = \frac{\Delta}{n}$ unterteilt. Es wird also für die Approximation der Zeitentwicklungsoperation

$$e^{-in\delta\hat{H}} |\phi\rangle = \exp\{-i\delta\hat{H}\} \cdots \exp\{-i\delta\hat{H}\} |\phi\rangle$$

jeder Faktor $\exp\{-i\delta\hat{H}\}$ sukzessive von rechts nach links durch Tridiagonalisierung des Hamiltonoperators in den n Krylow-Räumen

$$\mathcal{K}_{\hat{H}}^{\mathcal{L}}[U_{\text{näh.}}(\delta(n-1))|\phi\rangle], \dots, \mathcal{K}_{\hat{H}}^{\mathcal{L}}[U_{\text{näh.}}(\delta)|\phi\rangle], \mathcal{K}_{\hat{H}}^{\mathcal{L}}[|\phi\rangle]$$

angenähert. Die Hintereinanderanwendung auf den Zustand $|\phi\rangle$ ergibt dann die Approximation des Zustands $U(\Delta) |\phi\rangle$. Die dabei gewählten numerischen Parameter n und \mathcal{L} bestimmen, wie genau die Approximation dieses Zustands geschehen kann. In Abschnitt 4.2 wird der Einfluss der Wahl der Parameter auf die Genauigkeit besprochen.

4 Analyse der Genauigkeit

Um die Genauigkeit der Implementierung zu optimieren, ist es notwendig, herauszufinden, inwiefern darauf Einfluss genommen werden kann, indem die numerischen Parameter variiert werden. Diese sind die im vorherigen Abschnitt 3.4.2 definierten Größen \mathcal{L} und δ , also die Länge des Zeitschritts und die Dimension des Krylow-Raumes. Diese beiden Größen können direkt vorgegeben werden, wobei \mathcal{L} durch die Anzahl der Iterationen des Lanczos-Algorithmus gegeben ist. Zunächst aber muss geklärt werden, ob die Implementierung sich qualitativ richtig verhält, indem ein noch per Hand berechenbares Beispiel mit dem Computer untersucht wird.

4.1 Beispielrechnung

Das System sei durch das Gitter $\bullet \text{---} \bullet$ gegeben. Wenn die Verbindungslinie eine Tunnelstärke von 1 Teilchen pro Zeiteinheit bedeutet, lässt sich der aus diesem Gitter ergebende Hamiltonian mit dem Term $C_1^\dagger C_2 + C_2^\dagger C_1$ beschreiben. Mit den in Abschnitt 3.2 definierten Operatoren können die Matrixelemente mit Bezug auf die Konfigurationsbasis berechnet werden. Diese ist nach der hier üblicherweise verwendeten Reihenfolge gegeben durch $\{|1\rangle = |10\rangle, |2\rangle = |01\rangle\}$. Wenn die Platznummern von rechts nach links vergeben werden, ergibt sich die Wirkung des Hamiltonoperators auf die Basiszustände zu

$$\begin{aligned}\hat{H} |1\rangle &= C_1^\dagger C_2 |10\rangle + C_2^\dagger C_1 |10\rangle & \hat{H} |2\rangle &= C_1^\dagger C_2 |01\rangle + C_2^\dagger C_1 |01\rangle \\ &= C_1^\dagger |00\rangle + C_2^\dagger |0\rangle & &= C_2^\dagger |0\rangle + C_1^\dagger |00\rangle \\ &= |2\rangle + 0 & &= 0 + |1\rangle ,\end{aligned}$$

womit die Matrixelemente durch

$$\begin{aligned}\langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle &= 0 & \langle 1 | \hat{H} | 2 \rangle &= 1 \\ \langle 2 | \hat{H} | 1 \rangle &= 1 & \langle 2 | \hat{H} | 2 \rangle &= 0\end{aligned}$$

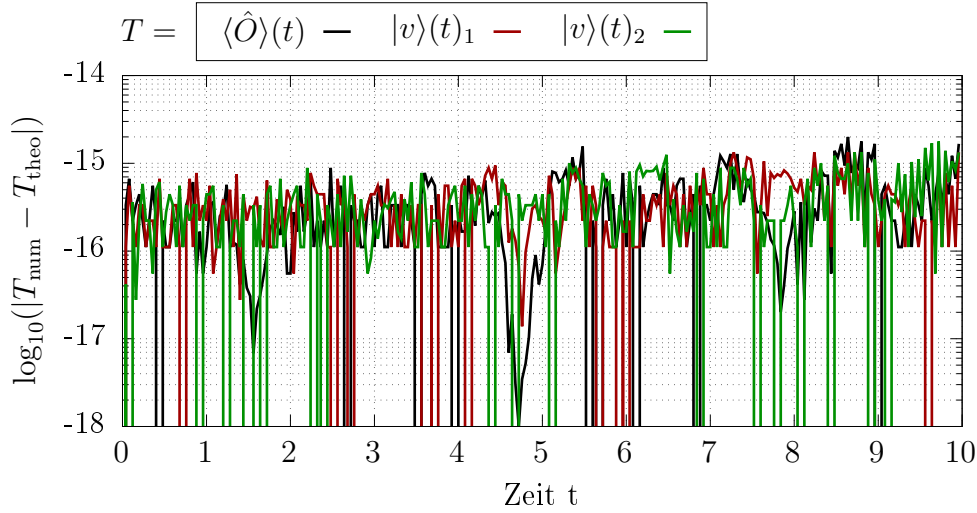


Abbildung 4.1: Die Analyse eines von Hand lösbaren Systems zeigt, dass die numerische Betrachtung im Rahmen der Maschinengenauigkeit exakt ist. Es ist jeweils der Betrag der Differenz zwischen numerisch berechnetem Wert und analytisch erhaltenem Wert dargestellt, wobei $\langle \hat{O} \rangle(t) = \cos^2(t)$, $|v\rangle(t)_1 = \cos(t)$ und $|v\rangle(t)_2 = -i \sin(t)$ gilt.

und die Matrixdarstellung durch $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ gegeben sind. Wir berechnen den Zeitentwicklungsoperator:

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp\left(-i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} t\right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-it} & 0 \\ 0 & e^{it} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-it} + e^{it} & e^{-it} - e^{it} \\ e^{-it} - e^{it} & e^{-it} + e^{it} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos t & -i \sin t \\ -i \sin t & \cos t \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wird als Ausgangssituation ein Teilchen auf dem Platz mit der Nummer 2 präpariert, so kann der physikalische Zustand zu diesem Zeitpunkt durch $|1\rangle$ modelliert werden. Die Matrixentsprechung ist $|v_0\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Der Teilchenzahloperator für dieses Teilsystem ist $C_2^\dagger C_2$, er hat die Matrixelemente $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Wir berechnen die

Teilchenzahl zum Zeitpunkt t :

$$\begin{aligned}
U(t) |v_0\rangle &= \begin{pmatrix} \cos t & -i \sin t \\ -i \sin t & \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos t \\ -i \sin t \end{pmatrix}, \\
\langle \hat{O} \rangle_{v(t)} &= \begin{pmatrix} \cos t \\ -i \sin t \end{pmatrix}^H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos t \\ -i \sin t \end{pmatrix} \\
&= \cos^2 t.
\end{aligned}$$

In Abb. 4.1 sind die entsprechenden numerischen Beobachtungen zusammengetragen. Dabei wurde der Vektor $|v\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ auf numerischem Wege zeitlich entwickelt und das jeweilige Ergebnis für erste bzw. zweite Komponente $|v\rangle(t)_{1/2}$, sowie Erwartungswert $\langle \hat{O} \rangle(t)$ des Subsystem-Teilchenzahloperators dargestellt. Bis auf maschinengenauigkeit ist die Abweichung 0. Es ist hierbei nicht von entscheidender Bedeutung, wie groß der Zeitschritt gewählt wird, da der Zeitentwicklungsoperator im Rahmen der Maschinengenauigkeit exakt berechnet werden kann, wenn $\mathcal{L} = \dim \mathcal{H}$ gilt.

4.2 Optimierung der numerischen Parameter

Im Falle der physikalisch interessanten Probleme können die errechneten Werte nicht mit einer analytischen Lösung verglichen werden. In Abschnitt 3.4.2 wurde diskutiert, dass die Zeitentwicklungsoperation bei längeren Entwicklungsintervallen in sukzessive Entwicklungen über Bruchteile des Intervalls der Länge δ zerlegt werden muss, wobei der Hamiltonoperator für jeden Entwicklungsschritt in einem Unterraum einer gewissen Dimension \mathcal{L} approximiert wird. Anstatt des Vergleichs mit einem analytisch errechneten Wert kann eine Aussage darüber getroffen werden, wie die numerischen Parameter gewählt werden müssen, um bei einer Verbesserung der Wahl der numerischen Parameter nur noch eine geringe (oder keine) Verbesserung des Ergebnisses zu erhalten. Dabei liegt eine mindestens eben so gute Approximation vor, wenn eine größere Krylow-Raumdimension oder ein kleinerer Zeitschritt gewählt wird. Bei einem festen Entwicklungszeitpunkt werden Zustände $|\psi; \mathcal{L}, \delta\rangle$ zu immer kleiner werdenden Zeitschritten δ bei einer festen Krylow-Raumdimension \mathcal{L} mit einem Zustand $|\psi; \checkmark\rangle$, der durch einen viel kleineren Zeitschritt bei einer hohen Dimension errechnet wurde, verglichen. So kann der qualitative Verlauf einer Kurve konstant geringer Abweichung von diesem Zustand ermittelt

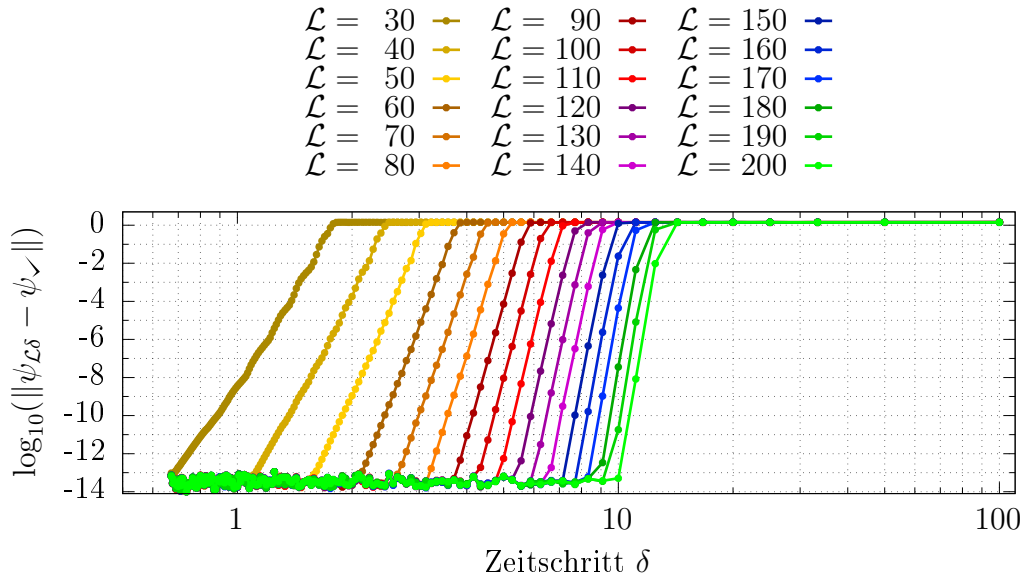


Abbildung 4.2: Es wird bis zur Zeit 100 entwickelt. Dargestellt ist die Abweichung des mit den Parametern \mathcal{L} und δ entwickelten Zustands von demjenigen, der mit den Parametern $\mathcal{L} = 250, \delta = 0.5$ entwickelt wurde.

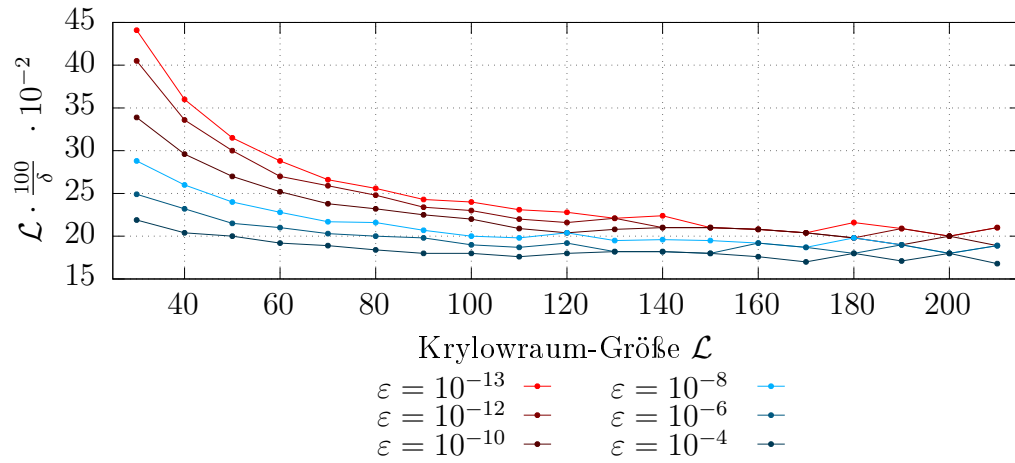


Abbildung 4.3: Die Anzahl der Matrixmultiplikationen ergibt sich wie folgt: pro berechnetem Basisvektor eine Multiplikation, pro Zeitschritt eine vollständig berechnete Basis, bei $\frac{100}{\delta}$ Zeitschritten also $\frac{\mathcal{L}100}{\delta}$ Multiplikationen. Die zugrunde liegenden Daten sind die selben wie schon in Abb. 4.2.

werden, die dann für die Eichung der Zeitentwicklungsroutine verwendet werden kann. In Abb. 4.2 ist die entsprechende Beobachtung dargestellt, es zeigt sich, dass der Zeitschritt für größere Krylow-Räume potentiell länger gewählt werden darf. Die Zeitentwicklung wurde hier in einem System, wie es später tatsächlich betrachtet wurde, verwendet. Das entsprechende Gitter ist in Abbildung 5.2 zu sehen.

Damit bei der Eichung der Zeitentwicklungsroutine die numerischen Parameter so gewählt werden, dass bei guter Genauigkeit gleichzeitig ein möglichst geringer numerischer Aufwand zu leisten ist, wird für jede Paarung \mathcal{L}, δ nicht nur die damit erzielte Genauigkeit, sondern auch die damit verbundene numerische Last in Betracht gezogen. Als ein Maß hierfür wird die Anzahl der Matrix-Vektor-Multiplikationen $\hat{H}|\psi\rangle$ gewählt, da die Multiplikation den mit Abstand aufwändigsten Schritt in der numerischen Realisierung darstellt und außerdem recht häufig vorkommt. Mit vorrangiger Beachtung der Genauigkeit wird dann eine günstige Paarung gewählt. Abb. 4.3 zeigt den numerischen Aufwand der in Abb. 4.2 dargestellten Parameter, welche eine Abweichung von etwa 10^{-13} und besser erreichen. Man bemerkt, dass der numerische Aufwand mit der Größe des Krylow-Raums auf einen Mindestaufwand zu sinken scheint.

5 Untersuchung zur Irreversibilität

In den bisherigen Teilen wurden die physikalischen und numerischen Grundlagen zur Behandlung der Thematik gelegt. Nun soll näher auf das Protokoll und seine physikalische Motivation eingegangen werden (s. 5.1). Eine gesonderte Stellung kommt der Störungsoperation (s. 5.4) zu, da die Definition einer Störung die dem klassischen Analogon gut entspricht essentiell für die Umsetzung ist. Im Anschluss werden die numerischen Ergebnisse präsentiert und diskutiert (s. 5.5).

5.1 Irreversibilität

Um das klassische Analogon aus der Einleitung (s. Abb. 5.1) im quantentheoretischen Sinne genau interpretieren zu können, muss es vor einem geeigneten Hintergrund betrachtet werden. Dieser Hintergrund ist die Untersuchung der chaotischen Dynamik mit Hilfe des Lyapunov-Exponenten. Eine ausführliche Darstellung findet sich in [5].

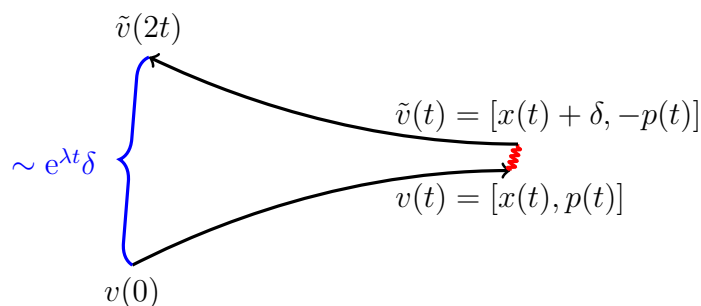


Abbildung 5.1: Das klassische Analogon des Protokolls, angelehnt an die Darstellung in [1].

5.2 Der Lyapunov-Exponent

Jeder möglichen Anfangsbedingung $v \in \mathbb{R}^n$ zu einer linearen Differentialgleichung $\dot{x} = A(t)x$ kann mit Hilfe der durch die der Anfangsbedingung zugeordneten Lösung $v(t)$ eine Zahl $\lambda(v)$ wie folgt zugeordnet werden:

$$\lambda(v) := \limsup_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \log \|v(t)\|.$$

Eine weitere Analyse zeigt, dass hierdurch eine Abbildung $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ festgelegt wird, die für jedes $A \in \text{Hom}(\mathbb{R}^n)$ maximal n verschiedene Werte annehmen kann. Tatsächlich wird nur jedem physikalischen Freiheitsgrad des Systems, das durch die DGL $\dot{x} = A(t)x$ beschrieben wird, eine andere Zahl zugeordnet. Es ergibt sich weiter für alle Lösungen $w(t)$:

$$\begin{aligned} \lambda &:= \max_v \lambda(v) \geq \frac{1}{t} \log \|w(t)\| \\ \Leftrightarrow \quad \exp(\lambda t) &\geq \|w(t)\|. \end{aligned}$$

Der so definierte sog. Lyapunov-Exponent λ ist also die größtmögliche Rate mit der Lösungen $w(t)$ und $w(t) + \varepsilon(t)$ auseinanderstreben. Es ergibt sich die Charakterisierung der Dynamik des Systems anhand von λ :

- $\lambda < 0$: Stationäres System, dissipative Phänomene führen dazu, dass die Trajektorien exponentiell zu einer Ruhelage konvergieren.
- $\lambda = 0$: Polynomiell auseinander laufende Trajektorien charakterisieren ein konservatives System.
- $\lambda > 0$: Hier ist das System meist exponentiell divergent.

Physikalische Systeme vieler Freiheitsgrade haben in der Regel einen positiven Lyapunov-Exponenten, die Trajektorien sind also instabil und divergent. Die maximale Rate, mit der leicht gestörte Anfangsbedingungen divergieren, ist hierbei durch den Lyapunov-Exponenten selbst gegeben und daher bereits durch Konstruktion unabhängig von Art und Stärke der Störung.

5.3 Reversibilitätstest im Quantensystem

Das Zeitumkehrungsprotokoll für den Reversibilitätstest ergibt sich also wie folgt: Wie im klassischen Fall wird ein Zustand zunächst um eine Zeitspanne t entwickelt, dann mit einem geeigneten Operator \hat{P} gestört und wieder um diese Spanne zurück entwickelt. Um das System bei Start und Ende dieser Prozedur physikalisch

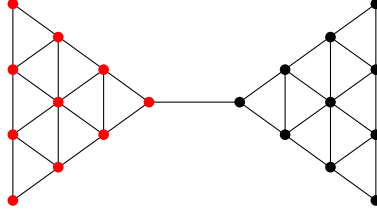


Abbildung 5.2: *Eine typisches System. Das normalerweise als das Anfangs voll besetzt gewählte Teilsystem ist rot gefärbt. Das dargestellte System im Besonderen wird für viele dargestellte Ergebnisse verwendet, da bereits hier bei vertretbarer Rechenzeit einige Endlichkeitseffekte verkleinert werden.*

vergleichen zu können, wird der Erwartungswert irgend einer Observablen \hat{O} am Anfang und zum Ende verglichen. Diese Observable soll ein generisches Maß für die makroskopisch bemerkbare Veränderung des Systems darstellen, muss also so gewählt werden, dass sich die Veränderung im Erwartungswert widerspiegelt. Von großer Wichtigkeit ist auch, dass zum Vergleich nicht etwa der mikroskopische Zustand des Systems herangezogen wird^{xi}: Wegen der hohen Zahl der Freiheitsgrade des Systems können orthogonale Zustände das System in physikalisch verschiedenen Zuständen großer makroskopischer Ähnlichkeit beschreiben.

Untersucht wird die Ähnlichkeit des Systems nach der zeitumgekehrten Entwicklung mit dem Ausgangszustand, wobei ein Ausgangszustand mit einer ausgeprägten Ungleichverteilung gewählt wurde. Die Vollständigkeit der Wiederherstellung ist dabei abhängig von der Entwicklungszeit t . Stellt sich diese Abhängigkeit dabei als exponentieller Abfall auf einen Langzeitwert heraus, so wird das System als irreversibel angesehen, im Falle eines nur polynomiellen Abfalls sieht man es als reversibel an. Auch wenn sich das Revival rascher als exponentiell einem gewissen Wert annähert, wird auf eine irreversible Dynamik geschlossen. Der Exponent, mit dem der Abfall auf einen Langzeitwert geschieht, stellt dabei das Analogon zum Lyapunov-Exponenten im klassischen Fall dar. Da dieser eine intrinsische und damit von Form und Stärke der Störung unabhängige Eigenschaft des Systems darstellt, wird die Dynamik im quantenmechanischen Fall nur als irreversibel angesehen, wenn der Abfall auch hier unabhängig von der Störung ist.

In der Praxis wurde als Modellhamiltonian ein Operator der Form $\sum_{ij} h_{ij} C_i^\dagger C_j$ mit endlichem Parameterbereich für i und j , $h_{ii} = 0$ und mit Feldoperatoren $C_i^{(\dagger)}$ mit der sog. Hard-Core-Eigenschaft $C_i^{\dagger 2} = 0$ gewählt. Mit diesem Hamiltonian wird ein System fester Teilchenzahl beschrieben, bei dem die Teilchen auf einem Gitter fester Platzanzahl zwischen Plätzen i und j mit $h_{ij} \neq 0$ tunneln dürfen. Abbildung 5.2

^{xi}z.B. durch das sog. Lohschmidt-Echo: $\mathcal{L}(t) = \left| \left\langle \exp(i(\hat{H} + \varepsilon \hat{V})t) \exp(-i\hat{H}t) \right\rangle_{\psi_0} \right|^2$

stellt ein solches Gitter dar. Als Observable \hat{O} wurde die Zahl der Teilchen in einem zur Anfangszeit voll befüllten Teilsystem gewählt, also $\hat{O} = \sum_{i \in S} C_i^\dagger C_i$. Die betrachtete Größe ist also

$$\langle \hat{O} \rangle_{U(-t)\hat{P}U(t)|\psi_0} - O_\infty,$$

wobei O_∞ den Erwartungswert von \hat{O} zu großen Zeiten darstellt.

Das vorgestellte Konzept erfordert die Definition einer geeigneten Störungsoperation. Es muss im Weiteren auch untersucht werden, inwiefern ein Limes kleiner Störung wohldefiniert gemacht werden kann, um klären zu können, ob der charakteristische Exponent unabhängig von der Stärke der Störung ist. Nur in diesem Fall kann es sich bei ihm um eine inhärente Eigenschaft des Systems selbst handeln.

5.4 Störoperation

Ein System zu stören bedeutet, das herrschende Paradigma der Zeitentwicklung punktuell durch ein Anderes zu ersetzen, das dem Vorherigen nicht zu sehr ähnelt. Dies wird z.B. erreicht, wenn das System für die Dauer eines gewissen kurzen Zeitintervalls α unter Einfluss eines anderen selbstadjungierten Operators als dem des System-Hamiltonians propagiert wird.

5.4.1 Einteilchenstörung

Besonders einfach lässt sich eine solche Störung im hier verwendeten Modell durch sog. *on-Site*-Wechselwirkungen $\sim C_i^\dagger C_i$ verwirklichen. Diese Art der Wechselwirkung lässt, wie der Modell-Hamiltonian, die Teilchenzahl konstant, wurde aber bisher nicht betrachtet. Einen beliebigen Störungsoperator dieser Form erhält man, wenn der Summand für jeden Platz im Gitter mit einer Zufallszahl ϕ_i multipliziert wird:

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \exp\left(-i\alpha \sum_{i=1}^N \phi_i C_i^\dagger C_i\right) \\ &= \bigotimes_{i=1}^N \exp\left(-i\alpha \phi_i C_i^\dagger C_i\right), \end{aligned}$$

wobei sich die Wirkung^{xii} auf einen Basis-Zustand $|n_1 \dots n_N\rangle$ zu $\exp(-i\alpha \sum n_i \phi_i) |\mathfrak{C}\rangle$ ergibt. Jede Komponente eines Zustandes wird also mit einer bestimmten Phase multipliziert, welche durch die Besetzungszahlen des entsprechenden Basis-Zustandes

^{xii}wegen der Hard-Core Eigenschaft ist $n_i \in \{0, 1\}$

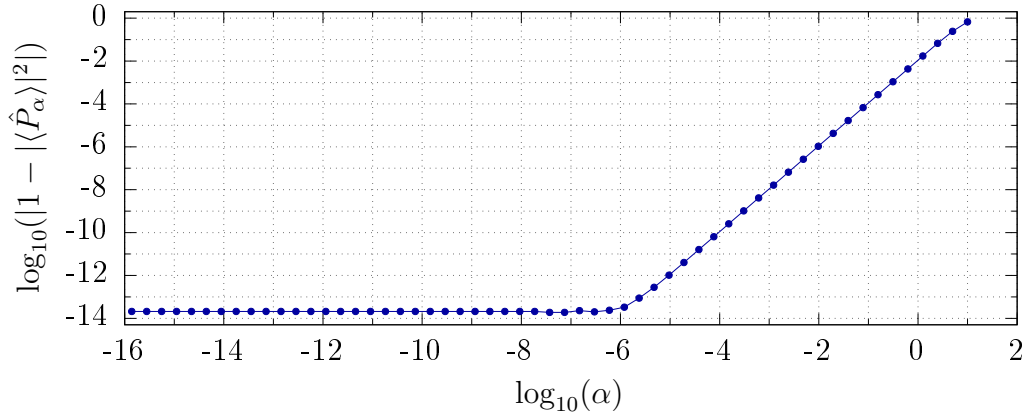


Abbildung 5.3: Der Überlapp zwischen einem gewissen Zustand und dem daraus nach einer gewissen Dauer der Störeinwirkung entstandenen Zustand sinkt polynomiell von 1 auf 0. Je nach Größe des Systems sind die Zustände nach kurzer Zeit orthogonalisiert. Für kleine Dauern wird die endliche Rechengenauigkeit ersichtlich.

vorgegeben wird. Wegen dieses Verhaltens wird die Störung auch *Phase-Kick* genannt. Da der Operator sich außerdem als Produkt von Operatoren, die nur auf ein Teilchen gleichzeitig wirken, schreiben lässt, wird die Störung auch Einteilchenstörung genannt. Da sich der Zustand bei Multiplikation jeder Komponente mit einer beliebigen Phase physikalisch nicht ändert, ist der Mittelwert der Verteilung, aus der die ϕ_i gezogen werden, unerheblich. Interessant ist aber die Varianz: die Größe des Parameters α bestimmt die Größe der Varianz der Größe $\alpha \cdot \sum n_i \phi_i$ und dadurch den Unterschied in den Phasen, mit denen die Komponenten eines Zustandes multipliziert werden. In der Praxis wurde für die Verteilung der ϕ_i eine Gleichverteilung mit Varianz $\frac{1}{12\sqrt{N}}$ gewählt, damit die Anzahl der Gitterplätze ohne Einfluss auf die Varianz verändert werden konnte.

5.4.2 Orthogonalisierung

Die Einteilchenstörung weist für kleine Systeme einen großen Nachteil auf: Weil der Überlapp zwischen Ausgangszustand und entwickeltem Zustand exponentiell mit der Größe des Systems abfällt, bleibt die Information über den Anfangszustand für kleine Systeme nach der Störung in trivialer Weise erhalten. In Abb. 5.3 ist der Wert $\left| \langle \hat{P} \rangle_\psi \right|^2 \propto \exp(-N \cdot r(t))$ in Abhängigkeit von α zu sehen. Für $|\psi\rangle$ wurde hierfür ein Zustand gewählt, der das System nach dem Verstreichen einer mittleren Zeitspanne beschreibt. Man erkennt, dass der Überlapp zwischen ursprünglichem

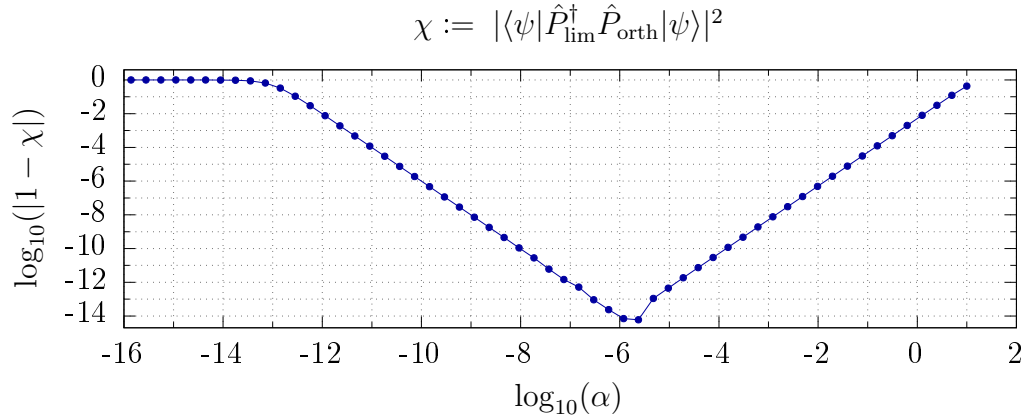


Abbildung 5.4: Dargestellt ist der Überlapp zwischen der normierten Orthogonal-komponente eines durch Einteilchenstörung zu endlicher Dauer gestörten Zustandes und dem analytischen Limes bei kurzer Dauer. Da sich der Überlapp für kurze Zeiten 1 annähert ist gezeigt, dass die numerische Routine im Rahmen der Rechengenauigkeit genau ist. Für kleine Zeiten ergibt sich durch *catastrophic-cancellation* bei der Berechnung der Differenz $\hat{P}|\psi\rangle - |\psi\rangle \cdot \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle$ ein wachsender Fehler in der Berechnung des Überlapps.

Zustand und gestörtem Zustand erst nach endlicher Zeit verschwindet. Um den endlichen Überlapp in kleinen Systemen zu eliminieren, wird in der Praxis ein Orthonormalisierungsschritt^{xiii} eingeführt: $\hat{P}|\psi\rangle \longrightarrow \left[\left(\hat{P} - |\psi\rangle\langle\psi| \hat{P} \right) |\psi\rangle \right]^0$.

5.4.3 Limes kurzer Störungsdauer

Im Limes kurzer Störungsdauer kann der Operator \hat{P} durch seine Taylor-Expansion zu erster Ordnung in α ersetzt werden. Sei mit \hat{S} der *Phase-Kick*-Operator $\sum \phi_i C_i^\dagger C_i$ bezeichnet:

$$\begin{aligned} \hat{P}|\psi\rangle &\longrightarrow \left[\left(\mathbb{1} - i\alpha\hat{S} \right) |\psi\rangle - |\psi\rangle\langle\psi| \left(\mathbb{1} - i\alpha\hat{S} \right) |\psi\rangle \right]^0 \\ &= \left[-i\alpha \left(\hat{S} - \langle\hat{S}\rangle_\psi \right) |\psi\rangle \right]^0 \\ &= -i \left[\left(\hat{S} - \langle\hat{S}\rangle_\psi \right) |\psi\rangle \right]^0, \end{aligned}$$

^{xiii}dabei soll mit $[\cdot]^0$ die Normalisierung bezeichnet werden

was wegen der Normierungsoperation unabhängig von α ist. In der Praxis wurde auch die globale Phase (Multiplikation mit $-i$) fortgelassen. Die numerische Untersuchung (s. Abb. 5.4) zeigt, dass für einen breiten Parameterbereich für α eine gute Übereinstimmung der Störung mit endlicher Dauer und im Limes kurzer Zeiten gegeben ist. Für besonders kleine Werte von α zeigt sich eine wachsende Diskrepanz.

5.4.4 Weitere Störungskonzepte

Die orthogonale Störung bei endlicher Störungsdauer gibt per Konstruktion einen vom ungestörten Zustand verschiedenen Zustand. Durch Verkleinerung der Störungsdauer nähert sich der gestörte Zustand also nicht dem vorherigen Zustand an. Auch die orthogonale Störung im Limes kurzer Störungsdauer liefert einen Zustand, der sich vom ungestörten Zustand unterscheidet. Ein „Limes kleiner Störung“ ist dadurch weniger einfach zu definieren als im klassischen Fall. Die orthogonale Störung im Limes kurzer Störungsdauer bietet einen guten Ausgangspunkt dafür, die Auswirkung verschiedener Störungsoperationen auf die Dynamik zu betrachten: Im Ausdruck $\hat{O}|\psi\rangle - |\psi\rangle\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$ kann der Störungseinfluss \hat{O} direkt verändert werden. Hier wurde für \hat{O} nur der Phase-Kick $\sum_i \phi_i \hat{n}_i$ in Betracht gezogen. Ein weiteres Modell wäre eine Nächst-Nachbar-Wechselwirkung $\sum_i \sum_{j(i)} \phi_{ij} C_i^\dagger C_j$.

5.5 Resultate

Das vorgestellte Modell $\hat{H} = \sum_{ij} h_{ij} C_i^\dagger C_j$ liefert die Möglichkeit, einfache, vielteilchentheoretische Modelle zu untersuchen, ohne dabei Genaueres, wie bsw. die Modellierung von Materialeigenschaften mit zu beachten. Die Anwendung des Protokolls auf bosonische Systeme wird nun in Abschnitt 5.5.1 besprochen, woran sich in Abschnitt 5.5.2 die Diskussion der Anwendung des Protokolls auf fermionische Systeme anschließt. Beide Teilchenarten werden dabei in dem in Abb. 5.2 dargestellten Gitter untersucht. Die linke Hälfte (im Bild rot) wird zum Anfangszeitpunkt mit den Teilchen bevölkert, die rechte Hälfte bleibt leer. Zur Beobachtung des makroskopischen Verhaltens bei zeitlicher Entwicklung wird die Anzahl der Teilchen auf den Plätzen des zu Anfang voll besetzten Teilsystems verfolgt.

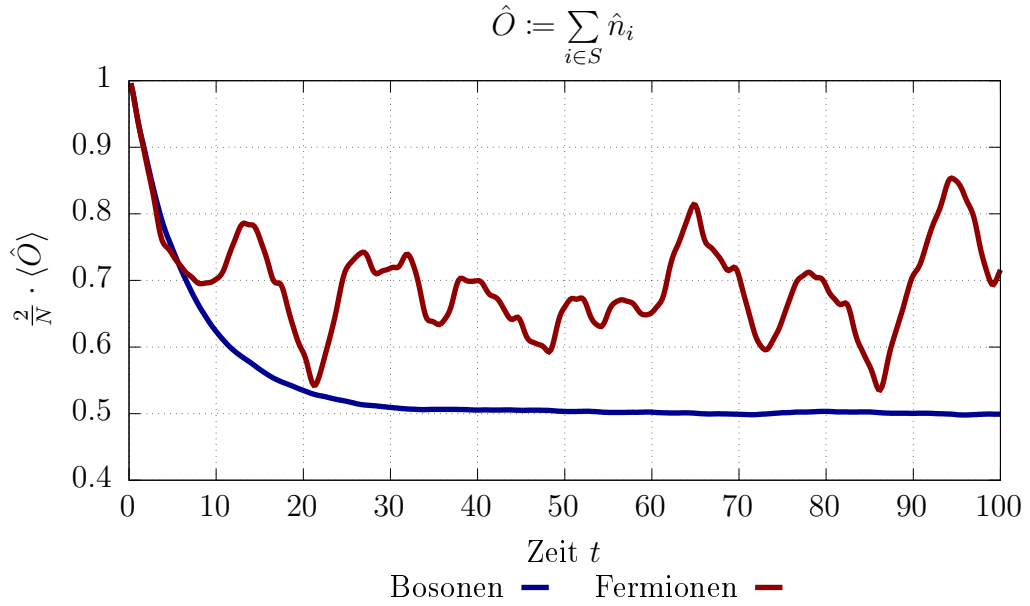


Abbildung 5.5: Untersucht wir das in Abb. 5.2 dargestellte System. Auf der vertikalen Achse ist der Erwartungswert der Observablen zur Teilchenzahl im anfangs befüllten Teilsystem S in Abhängigkeit der Zeit t aufgetragen. Stark unterschiedliches Verhalten zwischen Bosonen und Fermionen ist ersichtlich.

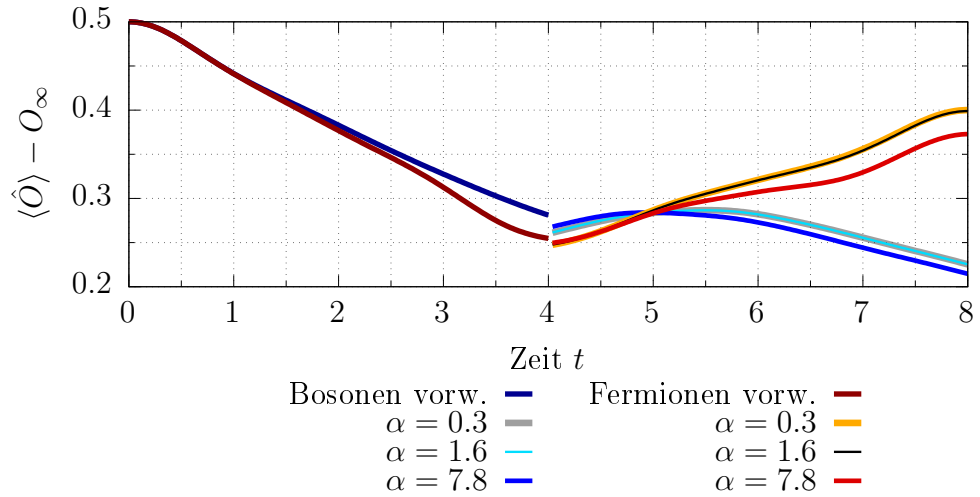


Abbildung 5.6: Bis zum Störzeitpunkt $t = 4$ ist die Dynamik vorwärts gerichtet. Dann wird der Zustand über vier Zeiteinheiten zurück entwickelt, wobei sich bei den Bosonen eine exponentiell wachsende Diskrepanz zeigt, bei den Fermionen eine lineare. Dargestellt sind Beobachtungen für unterschiedlich lange Störzeiten α .

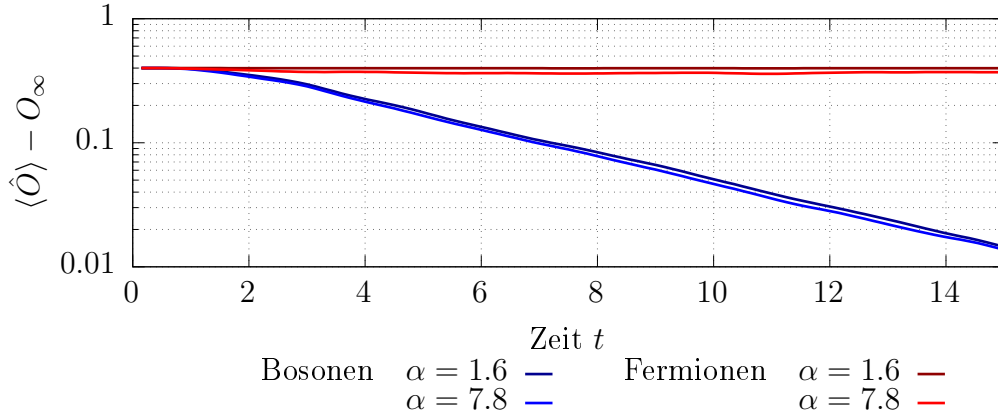


Abbildung 5.7: Hier ist die Abhängigkeit des Erwartungswertes im nach der Störung umgekehrt entwickelten Zustand von der Länge des Entwicklungsintervalls t vor der Störung dargestellt. Bei Fermionen ist dieser Wert unabhängig von t , bei Bosonen ergibt sich ein exponentieller Abfall. Das Verhalten ist bei langer und kurzer Störeinwirkung gleich.

5.5.1 Bosonische Systeme

In Abb. 5.5 sieht man, wie sich der Erwartungswert der Observablen $\sum_{i \in S} \hat{n}_i$ bei Anwendung des Protokolls mit der Zeit ändert, wenn die dort rot gefärbten Punkte das zur Anfangszeit voll befüllte Teilsystem S bilden. Der Erwartungswert nähert sich rasch dem Wert $\frac{N}{4}$, wobei die leichte Abweichung von diesem Wert der endlichen Zahl der Freiheitsgrade geschuldet ist (*finite-size-effect*). Der rasche Abfall könnte hier durch dissipative Elemente in der bosonischen Wechselwirkung erklärt werden. Der nächste Schritt, den das Protokoll vorsieht, ist die Störung des mikroskopischen Zustands nach Ablauf eines gewissen zeitlichen Intervalls. In Abb. 5.6 ist der Einfluss der in Abschnitt 5.4.2 beschriebenen orthogonalisierenden Störung dargestellt. Wie zu sehen ist hat die Dauer der Störzeit keinen Einfluss auf den qualitativen Verlauf der umgekehrten Dynamik, welche sich zunächst nur schwach, dann aber grundlegend von der Vorwärtsdynamik unterscheidet. Im Unterschied zur Arbeit [1], in welcher das Protokoll vorgeschlagen wurde stellt sich hier die größte Ähnlichkeit der Observable zum Wert am Ursprungszeitpunkt nicht nach Ablauf der Zeitumkehrung ein.

In Abb. 5.7 ist die Wiederherstellung nach Rückentwicklung bei verschiedenen langen Zeiten bis zur Störung dargestellt. Man erkennt, dass die Wiederherstellung ohne Abhängigkeit von der Dauer der Störung über die Zeit hin exponentiell schlechter wird. Der Exponent ist hierbei ebenfalls unabhängig von der Dauer der einwirkenden

Störung. Dies ist kennzeichnend für irreversible Dynamik: die Abweichung steigt und ist dabei unabhängig davon, wie stark die Störung die anfängliche Situation verändert.

5.5.2 Fermionische Systeme

Für die Diskussion eines fermionischen Systems wird wieder zum Anfangszeitpunkt die linke Hälfte der Plätze in dem in Abb. 5.2 dargestellte Gitter mit Fermionen besetzt und das Protokoll angewendet. Die entsprechenden Abbildungen sind bereits im vorherigen Kapitel referenziert, dabei zeigt Abb. 5.5 die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes $\langle \sum_{i \in S} \hat{n}_i \rangle$, Abb. 5.6 den Einfluss der orthogonalisierenden Störung und Abb. 5.7 das Echo für verschiedene Entwicklungszeiten.

Während sich der Erwartungswert bei den Bosonen einer Konstanten angenähert hatte, beobachtet man hier starke Oszillationen ohne besonderen Rhythmus. Diese Abweichungen können nicht mehr mit Endlichkeitseffekten erklärt werden, vielmehr zeigt sich hier eine Erhaltung der stark asymmetrischen Verteilung zum Anfangszeitpunkt: Es deutlich ersichtlich, dass der zeitliche Mittelwert des Erwartungswertes einen Wert oberhalb von $\frac{1}{2}$ annimmt. Dies ist ein Hinweis auf mögliche Zustände, die in der Zusammensetzung des Zustandes superponieren, für die die Teilchen im linken Teil des Gitters lokalisiert bleiben. Statt, dass sich für jeden Platz des Gitters ein gleicher Wert für die Teilchendichte ergibt, wie es bei den Bosonen zu erwarten ist, ergibt sich hier also für die Plätze in der linken Hälfte ein größerer Wert für die Plätze des linken Teilsystems. Diese Abweichung weist auf eine Abhängigkeit des zeitlichen Mittels vom Anfangszustand hin, die auch tatsächlich analytisch erwartet wird: Für das fermionische System ist die Zeitentwicklung eines Feldoperators $d_\alpha^{(\dagger)}$ in der Basis der Energiezustände im Heisenbergbild durch $d_{H\alpha}(t) = d_{H\alpha}(0) e^{-i\varepsilon_\alpha t}$ gegeben. Das zeitliche Mittel ergibt sich nach Basiswechsel des Operators \hat{O} in die Energiebasis zu

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{\alpha\alpha'} d_\alpha^\dagger(0) d_{\alpha'} e^{it\varepsilon_\alpha} e^{-it\varepsilon_{\alpha'}} O_{\alpha\alpha'} \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha} \langle d_\alpha^\dagger(0) d_\alpha(0) \rangle O_{\alpha\alpha'}, \end{aligned}$$

da die zeitlichen Mittel der Winkelfunktionen $\exp(it(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha'}))$ für $\alpha \neq \alpha'$ verschwinden. Der Zeitliche Mittelwert wird also vom Anfangswert der Observablen $d_\alpha^\dagger d_{\alpha'}$ bestimmt. Die stark asymmetrische Verteilung wird also bis zu einem gewissen Grade erhalten und der Wert O_∞ , der hier nicht als Langzeitwert sondern als Mittelwert gewählt werden soll verschiebt sich.

Die Abweichung des Erwartungswertes während der rückwärts gerichteten Dynamik zu den Werten während der vorwärts gerichteten Dynamik fällt unabhängig von der Dauer des störenden Einflusses qualitativ gering aus (s. 5.6), man beobachtet eine in t lineare Abweichung. Die Auswertung des Wertes $\langle \hat{O} \rangle_{U(-t)\hat{P}U(t)|\psi_0} - O_\infty$ für verschiedene Zeiten t und Störungsdauern α macht ersichtlich, dass die Wiederherstellung des Anfangszustandes ohne Abhängigkeit von der Dauer der Störung nach Ablauf beliebig langer Zeiten gelingt. All das ist kennzeichnende Eigenschaft einer reversiblen Dynamik: Die Abweichung steigt höchstens algebraisch (hier steigt sie nicht) und dieses Verhalten ist unabhängig von der Stärke der Störung.

6 Fazit und Diskussion

Zum Abschluss soll ein Überblick über interessante offen gebliebene Fragen im Sachbezug gegeben sowie die erreichten Ziele benannt werden.

Besonders relevant für das Protokoll ist der Schritt der Störung. Nach diesem Schritt soll festgestellt werden, ob durch die Dynamik Information über den Anfangszustand vernichtet wird, um das festzustellen darf die Information also nicht durch die Störung selbst vernichtet werden. Durch die Einführung der orthogonalisierenden Störung wurde sicher gestellt, dass Information über die Anfangskonfiguration nicht in trivialer Weise erhalten bleibt, es wurde aber nicht betrachtet, inwiefern die Form der Störoperation (z. B. der Phasekick \hat{S}) Einfluss darauf hat, wie „stark“ die Störung zu interpretieren ist. Durch nähere Betrachtung anderer Formen der Wechselwirkung könnte geklärt werden, ob durch die Störung in trivialer Weise Information über den Ausgangspunkt vernichtet wird. Die Betrachtung dieser Störung im Limes kurzer Dauer zeigte, dass mit dieser Art der Störung eine Unterscheidung nach „Stärke der Störung“ nicht so einfach zu erreichen ist.

Bei dem untersuchten fermionischen System zeigte sich eine Abhängigkeit des zeitlichen Mittelwertes O_∞ vom Anfangszustand. Die Analyse der Differenz $\langle \hat{O} \rangle_{U(-t)\hat{P}U(t)|\psi_0} - O_\infty$ bleibt davon unberührt, es muss lediglich der Wert O_∞ neu ermittelt werden. Das Verhalten der Wiederkehr des Erwartungswertes nach vollständiger Zeitumkehr erscheint für die Bosonen wesentlich anders als für das Beispielsystem der Arbeit, in welcher das Protokoll vorgeschlagen wurde (s. [1]). Das dort betrachtete System ist eine Kette wechselwirkender Spins, das sich im Anfangszeitpunkt in einem wohlgeordneten Zustand der Form $|+ - \dots + -\rangle$ (Néel-Zustand) befindet. Dass dieser Anfangszustand eine wesentlich andere Anordnung charakterisiert als der in dieser Arbeit gewählte, mag ein Grund dafür sein, dass sich das Verhalten sehr unterscheidet. Aus diesem Grund muss auch die Abhängigkeit des Verhaltens vom gewählten Anfangszustand untersucht werden.

Die Interpretation des Resultats, also der Verlauf des Wertes $\langle \hat{O} \rangle_{U(-t)\hat{P}U(t)|\psi_0} - O_\infty$ bei Änderung des Entwicklungspunktes t kann hier nur qualitativ erfolgen. Es konnte dadurch leicht ein Unterschied zwischen dem Verhalten von Fermionen und Bosonen auf dem gleichen Gitter betrachtet werden, jedoch ist unklar, wie der Wert des charakteristischen Exponenten zu werten ist, mit dem der Abfall auf O_∞ im Fall der Bosonen geschieht. Konkret kann gefragt werden, welchen

Einfluss die Geometrie des Gitters, auf dem die Teilchen betrachtet werden, auf den Exponenten hat. Die Dynamik der fermionischen Systeme wurde nur bei einer verhältnismäßig kleinen Anzahl an Freiheitsgraden beobachtet. Die Heisenbergsche Bewegungsgleichung für die Dichtematrix $\langle C_i^\dagger C_j \rangle$ kann mit numerischen Methoden für eine wesentlich größere Zahl der Freiheitsgrade gelöst werden. So könnte bsw. untersucht werden, ob durch die Einführung von *on-Site*-Wechselwirkungen auf vereinzelter Plätzen (sog. *Impurities*) irreversible Dynamik in einem fermionischen System beobachtet werden kann.

7 Danksagung

Eine Arbeit schreibt sich nicht (von) allein: Man braucht Hilfe dazu. Ich danke meiner Familie für die Unterstützung während der nicht wenig holprigen Einarbeitungsphase — jetzt habe ich endlich wieder Zeit für Unternehmungen wie etwa Holz hacken. Ich danke im Besonderen meinem Betreuer Prof. Dr. Martin Eckstein, der sich unermüdlich in langen und spannenden Diskussionen bemüht hat mir den Weg zur den physikalischen Verheißungen hinter der Numerik zu weisen — und der auch in den Fragen zur numerischen Verwirklichung immer die richtige Ansprechperson gewesen ist. Zu guter Letzt geht ein besonderer Dank an meine liebste Freundin und Lebensgefährtin Julia, die versucht hat mich in die höheren Weihen der edlen Kunst der Kommasetzung einzuführen — Ich hab's ganz sicher immer noch nicht verstanden. Außerdem hat sie zuletzt mein frühes Gehen und spätes Wiederkommen ertragen müssen.

Herzlichen Dank euch allen!

Literaturverzeichnis

- [1] Schmitt, Markus ; Kehrein, Stefan: Irreversible dynamics in quantum many-body systems. In: *arXiv preprint arXiv:1711.00015* (2017) [3](#), [27](#), [35](#), [38](#)
- [2] Cohen-Tannoudji, Claude ; Diu, Bernard ; Laloë, Franck: *Quantenmechanik*. Bd. 1. Walter de Gruyter, 2013 [5](#), [7](#)
- [3] Stefanucci, Gianluca ; Van Leeuwen, Robert: *Nonequilibrium many-body theory of quantum systems: a modern introduction*. Cambridge University Press, 2013 [8](#)
- [4] Axmann, Thomas: *Code-Base: Bachelorarbeit zur irreversiblen Dynamik in Quantensystemen*. <https://github.com/Abraxas-Knister/ba-code.git>. Version: 1. Oktober 2018 [14](#)
- [5] Barreira, Luis ; Pesin, Ya B.: *Lyapunov exponents and smooth ergodic theory*. Bd. 23. American Mathematical Soc., 2002 [27](#)

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbständig verfasst habe. Ich versichere, dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe, und dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist.

Nürnberg, den 29. September 2018

Thomas Axmann