

Quantenrelaxation und Thermalisierung im transversalen Ising-Modell

Dissertation

zur Erlangung des Grades

des Doktors der Naturwissenschaften

der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät

der Universität des Saarlandes

von

Benjamin Maximilian Blaß

Saarbrücken

2017

Tag des Kolloquiums: 03.08.2017

Dekan: Univ.-Prof. Dr. Guido Kickelbick

Mitglieder des
Prüfungsausschusses: Univ.-Prof. Dr. Dr. h. c. Heiko Rieger
Univ.-Prof. Dr. Giovanna Morigi
Univ.-Prof. Dr. Götz S. Uhrig
Univ.-Prof. Dr. Romanus Dyczij-Edlinger
Dr. Elke Neu-Ruffing

Eidesstattliche Versicherung

Hiermit versichere ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet. Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form in einem Verfahren zur Erlangung eines akademischen Grades vorgelegt.

Ort, Datum

Unterschrift

Benjamin Maximilian Blaß

Zusammenfassung

Die vorliegende Dissertation untersucht die Nichtgleichgewichtsdynamik des eindimensionalen transversalen XY-Modells sowie des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells auf dem Quadratgitter nach Quenches eines oder mehrerer Parameter ihrer Hamiltonoperatoren. Das eindimensionale System ist integrabel und sein Hamiltonoperator kann durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden. Demgegenüber ist das zweidimensionale transversale Ising-Modell nichtintegrabel und kann nicht analytisch gelöst werden. Für das eindimensionale transversale XY-Modell wird die Zeitentwicklung verschiedener Observablen wie Magnetisierung, Korrelationsfunktionen und Verschränkungsentropie mithilfe von Freie-Fermionen-Techniken berechnet und mit den Resultaten einer semiklassischen Theorie zur Beschreibung des Relaxationsprozesses verglichen. Zudem wird gezeigt, dass der stationäre Zustand des Systems durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann. Die Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells wird mithilfe eines Variations-Monte-Carlo-Verfahrens bestimmt und das System nach verschiedenen Quenchprotokollen auf Thermalisierung untersucht, d. h. es wird die Frage beantwortet, ob sein stationärer Zustand durch das kanonische Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann. Weiterhin wird mithilfe von zeitabhängiger Mean-Field-Theorie auf Grundlage der BBGKY-Hierarchie die Ausbreitung einer zu Beginn lokalen Störung untersucht.

Summary

The thesis at hand studies the non-equilibrium dynamics of the one-dimensional transverse-field XY model as well as of the two-dimensional transverse-field Ising model on the square lattice after quenches of one or more parameters of their Hamiltonians. The one-dimensional system is integrable and its Hamiltonian can be diagonalized by a transformation to a system of free fermions. In contrast to this the two-dimensional transverse-field Ising model is nonintegrable and cannot be solved analytically. For the one-dimensional transverse-field XY model the time evolution of different observables like magnetization, correlation functions and entanglement entropy is computed with free fermion techniques and compared to the results of a semiclassical theory for the relaxation process. Moreover it is shown that the stationary states of the system can be described by the generalized Gibbs ensemble. The time evolution of the two-dimensional transverse-field Ising model is determined with a variational Monte Carlo method and the system is tested for thermalization after different quench protocols, i.e. the question is answered whether its stationary state can be described by the canonical Gibbs ensemble. Furthermore using time-dependent mean field theory based on the BBGKY hierarchy the spreading of an initially local perturbation is studied.

Publikationsliste

Bei der vorliegenden Dissertation handelt es sich um eine Fortführung der Diplomarbeit

B. Blaß

Quantenrelaxation in der Spin- $1/2$ -XY-Kette mit freien Randbedingungen

Diplomarbeit, Universität des Saarlandes, Theoretische Physik, AG Prof. Dr. Heiko Rieger (2011)

Die Untersuchungen zum eindimensionalen transversalen XY-Modell bauen auf ihren Resultaten auf.

Die in der vorliegenden Dissertation präsentierten Methoden und Ergebnisse wurden in Auszügen in den folgenden wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht:

1. **B. Blaß**, H. Rieger und F. Iglói
Quantum relaxation and finite-size effects in the XY chain in a transverse field after global quenches
EPL, **99** (2012) 30004
2. **B. Blaß** und H. Rieger
Test of quantum thermalization in the two-dimensional transverse-field Ising model
Sci. Rep. **6**, 38185 (2016)
3. J. Hafner, **B. Blaß** und H. Rieger
Light cone in the two-dimensional transverse-field Ising model in time-dependent mean-field theory
EPL, **116** (2016) 60002

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung zur Nichtgleichgewichtsdynamik	1
1.1	Motivation: Der Quantencomputer	1
1.2	Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme	4
1.2.1	Zentrale Fragestellungen der Nichtgleichgewichtsdynamik	6
1.2.2	Quenchprotokoll	7
1.2.3	Zeitentwicklung in der Energieeigenbasis	8
1.2.4	Stationärer Zustand	9
2	Das transversale Ising- und XY-Modell	25
3	Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen XY-Modells in 1D	33
3.1	Diagonalisierung des Hamiltonoperators	33
3.1.1	Freie Randbedingungen	33
3.1.2	Periodische Randbedingungen	38
3.1.3	Spektrum des Hamiltonoperators	42
3.2	Observablen	45
3.3	Exakte Beschreibung des Relaxationsprozesses: Freie-Fermionen-Technik	47
3.3.1	Korrelationsfunktionen	49
3.3.2	Lokale Magnetisierung	51
3.3.3	Verschrankungsentropie	52
3.4	Semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses	54
3.4.1	Quasiteilchencharakteristik	54
3.4.2	Semiklassische Theorie	58
3.4.3	Finite-Size-Effekte	59
3.4.4	Besetzungszahl der Quasiteilchen	61
3.4.5	Berechnung der Observablen	62
3.4.6	Thermodynamischer Limes und modifizierte Besetzungszahl	70
3.5	Resultate	72
3.6	Vergleich zu Systemen im thermischen Gleichgewicht und verallgemeinertes Gibbs-Ensemble	79
3.7	Divergenz der Relaxationszeit und der Korrelationslänge	83
3.8	Änderung des Quenchprotokolls: Rückquench	86
3.8.1	Freie-Fermionen-Technik	86
3.8.2	Semiklassische Theorie	88
3.8.3	Thermodynamischer Limes	91
3.8.4	Resultate	93
4	Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising-Modells in 2D	95
4.1	Observablen	100
4.2	Quenchprotokolle	101
4.3	Nichtdiagonalisierbarkeit des Hamiltonoperators	103
4.4	System im thermischen Gleichgewicht	106
4.4.1	Thermische Erwartungswerte	106
4.4.2	Anwendung auf das transversale Ising-Modell	107
4.4.3	Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit	111
4.4.4	Resultate	112
4.5	Effektive Temperatur	116
4.6	Zeitentwicklung - Überblick	119
4.7	Zeitabhängige Störungstheorie	121
4.8	Variations-Monte-Carlo in Realzeit	126
4.8.1	Wechselwirkungsquenchs	127
4.8.2	Feldquenchs	135
4.8.3	Resultate	146
4.9	Relaxationsprozess in Subsystemen	169
4.10	Ausbreitung einer lokalen Störung	180

5 Zusammenfassung und Ausblick	187
Danksagung	191
Literatur	193
Anhang	211
A Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs	211
B Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs	213
C Anfangswerte der Variationsparameter im Jastrowansatz für $J_0 \neq 0$	216
D Anwendung von Variations-Monte-Carlo in Realzeit auf das eindimensionale transversale Ising-Modell nach Feldquenchs	221
E Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Feldquenchs	224

Abkürzungsverzeichnis

- **LRB**: Lieb-Robinson Bound
- **CGE**: Canonical Gibbs Ensemble
(kanonisches Gibbs-Ensemble)
- **GGE**: Generalized Gibbs Ensemble
(verallgemeinertes Gibbs-Ensemble)
- **TFIM**: transverse-field Ising Model
(transversales Ising-Modell)
- **TFXYM**: transverse-field XY Model
(transversales XY-Modell)
- **BHM**: Bose-Hubbard Model
(Bose-Hubbard-Modell)
- **FRB**: freie Randbedingungen
- **PRB**: periodische Randbedingungen
- **rt-VMC**: real-time Variational Monte Carlo
(Variations-Monte-Carlo in Realzeit)
- **t-DMRG**: time-dependent Density Matrix Renormalization Group
(zeitabhängige Dichtematrixrenormierungsgruppe)
- **ETH**: Eigenstate Thermalization Hypothesis
- **RES**: Rare Event Sampling

Abbildungsverzeichnis

1.1	Isoliertes System - offenes System	4
1.2	Cheneau <i>et al.</i> : Quasiteilchen 1D-BHM	5
1.3	Manhattan-Metrik - euklidische Metrik	6
1.4	Quenchprotokoll	7
1.5	Ensemblemittel - Zeitmittel	10
1.6	Equilibrierung / Thermalisierung	11
1.7	Kinoshita <i>et al.</i> : 1D-Bose-Gas in anharmonischer Falle	12
1.8	Rigol <i>et al.</i> : Hard-Core-Bosonen auf 2D-Gitter	14
1.9	Rigol: Hard-Core-Bosonen / Fermionen auf 1D-Gitter	15
1.10	Kollath <i>et al.</i> : Nichtgleichgewichtsphasendiagramm 1D-BHM	16
1.11	Carleo <i>et al.</i> : Vergleich rt-VMC-Resultate - t-DMRG-Resultate 1D-BHM	17
1.12	Carleo <i>et al.</i> : rt-VMC-Resultate 1D-BHM / 2D-BHM	18
1.13	Hamazaki <i>et al.</i> : Hard-Core-Bosonen auf Dreiecksgitter	20
2.1	Untere Schranke Betrag Magnetisierung	28
2.2	Phasendiagramm 1D-TFIM / 2D-TFIM	29
2.3	Ferromagnetische Ordnung im TFIM für $T > 0$	30
3.1	Energielücke im 1D-TFXYM mit FRB	43
3.2	Parameterbereich mit Minimum von Λ_k für 1D-TFXYM	44
3.3	Verlauf Λ_k für 1D-TFXYM	44
3.4	Quasiteilchen im 1D-TFIM mit FRB	55
3.5	Maximalgeschwindigkeit Quasiteilchen im 1D-TFXYM	56
3.6	Bewegung Quasiteilchenpaar	57
3.7	Beitrag Quasiteilchenpaar zur Korrelationsfunktion	58
3.8	Beitrag Quasiteilchenpaar zur Verschränkungsentropie	59
3.9	Positionen der Spinkette mit Beitrag zur lokalen Magnetisierung	64
3.10	Positionen der Spinkette mit Beitrag zur gleichzeitigen Korrelationsfunktion	66
3.11	Positionen der Spinkette mit Beitrag zur Verschränkungsentropie	68
3.12	Quenchprotokolle 1D-TFXYM	72
3.13	Spektrum Hamiltonoperator 1D-TFXYM nach Quenchprotokollen	73
3.14	Zeitentwicklung Verschränkungsentropie 1D-TFXYM mit FRB	74
3.15	Zeitentwicklung Verschränkungsentropie 1D-TFXYM mit PRB	75
3.16	Zeitentwicklung lokale Magnetisierung 1D-TFXYM mit FRB	76
3.17	Bulk-Korrelationsfunktion 1D-TFXYM mit FRB	77
3.18	Gleichzeitige Korrelationsfunktion 1D-TFXYM mit PRB	78
3.19	Rossini <i>et al.</i> : Vergleich Relaxationsrate / Korrelationslänge 1D-TFIM exakt - thermisch - semiklassisch	80
3.20	Modenabhängige effektive Temperatur im 1D-TFXYM nach Quenchprotokollen	82
3.21	Quenchstärke in Polardarstellung in der h - γ -Ebene	83
3.22	Divergenz Relaxationszeit / Korrelationslänge mit verschwindender Quenchstärke	85
3.23	Divergenz Relaxationszeit / Korrelationslänge (logarithmische Auftragung)	85
3.24	Zeitentwicklung lokale Magnetisierung 1D-TFXYM mit FRB nach Rückquench	94
4.1	Fratous und Srednicki: Gesamtmagnetisierung 2D-TFIM in Energieeigenzuständen mit verschwindendem Gesamtimpuls	96
4.2	Mondaini <i>et al.</i> : Strukturelle Entropie / ferromagnetische Strukturfaktor 2D-TFIM	97
4.3	2D-Jordan-Wigner-Transformation (Azzouz)	104
4.4	2D-Jordan-Wigner-Transformation (Azzouz) - nächste Nachbarn	105
4.5	Weltlinienkonfiguration 1D-TFIM	108
4.6	Swendsen-Wang-Cluster-Algorithmus	112
4.7	Vergleich thermischer Erwartungswert renormierter Betrag Magnetisierung exakte Diagonalisierung - Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus	113
4.8	Vergleich thermischer Erwartungswert Energie pro Spin exakte Diagonalisierung - Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus	113
4.9	Thermischer Erwartungswert renormierter Betrag Magnetisierung 2D-TFIM	114
4.10	Thermischer Erwartungswert Energie pro Spin 2D-TFIM	115

4.11	Energie pro Spin / renormierter Betrag Magnetisierung 2D-TFIM mit Energieisolines	115
4.12	Bestimmung effektive Temperatur 2D-TFIM nach Wechselwirkungs- / Feldquenchs	116
4.13	Effektive Temperatur 2D-TFIM nach Wechselwirkungs- / Feldquenchs	117
4.14	Zeitentwicklung Magnetisierung 2D-TFIM nach Feldquenchs (zeitabhängige Störungstheorie)	124
4.15	Konvergenz rt-VMC-Verfahren 2D-TFIM nach Wechselwirkungsquenchs	131
4.16	Vergleich renormierter Betrag Magnetisierung 2D-TFIM nach Wechselwirkungsquenchs rt-VMC-Verfahren - numerische Integration Schrödingergleichung	132
4.17	Vergleich gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn 2D-TFIM nach Wechsel- wirkungsquenchs rt-VMC-Verfahren - numerische Integration Schrödingergleichung	133
4.18	Relativer Fehler Zeitmittelwerte renormierter Betrag Magnetisierung / gleichzeitige Kor- relationsfunktion nächster Nachbarn nach Wechselwirkungsquenchs	134
4.19	Stabilität Zeitmittelwerte nach Wechselwirkungsquenchs gegenüber Änderung der Länge des Zeitintervalls	135
4.20	Überlapp Eigenzustände Hamiltonoperator nach Feldquench - Anfangszustand	136
4.21	Bandstruktur Eigenwerte Hamiltonoperator des 3×3 -Systems	136
4.22	Entwicklungskoeffizienten der drei Eigenzustände von \hat{H} mit größtem Überlapp mit An- fangszustand	137
4.23	Anzahl Variationsparameter in Ansatzfunktion des rt-VMC-Verfahrens für 2D-TFIM nach Feldquenchs	139
4.24	Vergleich renormierter Betrag Magnetisierung 2D-TFIM nach Feldquenchs rt-VMC-Verfahren - numerische Integration Schrödingergleichung	143
4.25	Vergleich gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn 2D-TFIM nach Feldquenchs rt-VMC-Verfahren - numerische Integration Schrödingergleichung	144
4.26	Relativer Fehler Zeitmittelwerte renormierter Betrag Magnetisierung / gleichzeitige Kor- relationsfunktion nächster Nachbarn nach Feldquenchs	145
4.27	Stabilität Zeitmittelwerte nach Feldquenchs gegenüber Änderung der Länge des Zeitintervalls	146
4.28	Zeitlicher Verlauf Erwartungswerte renormierter Betrag Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM nach Wechselwirkungsquenchs	148
4.29	Zeitlicher Verlauf Erwartungswerte renormierter Betrag Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM nach Feldquenchs	150
4.30	Vergleich thermischer Erwartungswert - zeitlicher Mittelwert renormierter Betrag Magne- tisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn im 2D-TFIM nach Wech- selwirkungsquenchs	152
4.31	Vergleich thermischer Erwartungswert - zeitlicher Mittelwert renormierter Betrag Magne- tisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn im 2D-TFIM nach Feld- quenchs	153
4.32	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 4×4 - Gitter nach Wechselwirkungsquenchs	155
4.33	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 8×8 - Gitter nach Wechselwirkungsquenchs	156
4.34	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 12×12 - Gitter nach Wechselwirkungsquenchs	157
4.35	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 16×16 - Gitter nach Wechselwirkungsquenchs	158
4.36	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 4×4 - Gitter nach Feldquenchs	160
4.37	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 8×8 - Gitter nach Feldquenchs	161
4.38	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 12×12 - Gitter nach Feldquenchs	162
4.39	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung / gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn für 2D-TFIM auf 16×16 - Gitter nach Feldquenchs	163
4.40	Abweichung thermische - zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach Wechselwir- kungsquenchs	165
4.41	Abweichung thermische - zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach Feldquenchs	165

4.42	Vergleich thermischen Erwartungswerte - zeitlichen Mittelwerte langreichweitige Korrelationen im 2D-TFIM nach Wechselwirkungs- / Felquenchs	167
4.43	Unterteilung Gesamtsystem in Subsystem, Bad, Wechselwirkung Subsystem - Bad	169
4.44	Zeitlicher Verlauf Erwartungswert renormierter Betrag Magnetisierung isoliertes 4×4 -System / 4×4 -Subsystem des 8×8 -, 12×12 -, 16×16 -Systems nach Feldquenchs	171
4.45	Vergleich thermischer Erwartungswert - zeitlicher Mittelwert renormierter Betrag Magnetisierung isoliertes 4×4 -System / 4×4 -Subsystem des 8×8 -, 12×12 -, 16×16 -Systems nach Feldquenchs	172
4.46	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung isoliertes 4×4 -System / 4×4 -Subsystem des 8×8 -Systems nach Feldquenchs	173
4.47	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung 4×4 -Subsystem des 12×12 - / 16×16 -Systems nach Feldquenchs	174
4.48	Zeitlicher Verlauf Erwartungswert renormierter Betrag Magnetisierung isoliertes 8×8 -System / 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems nach Feldquenchs	175
4.49	Vergleich thermischer Erwartungswert - zeitlicher Mittelwert renormierter Betrag Magnetisierung isoliertes 8×8 -System / 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems nach Feldquenchs	175
4.50	Wahrscheinlichkeitsverteilung Magnetisierung isoliertes 8×8 -System / 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems nach Feldquenchs	176
4.51	Unterteilung Gesamtsystem in identische Subsysteme und Wechselwirkung	177
4.52	Zeitlicher Verlauf Erwartungswert Energie Subsystem	178
4.53	Vergleich thermischer Erwartungswert - zeitlicher Mittelwert Energie in 4×4 -Subsystem des 2D-TFIM nach Feldquenchs	179
4.54	Überprüfung zeitabhängige Mean-Field-Theorie	182
4.55	Ausbreitung lokale Störung im 2D-TFIM	183
4.56	Light Cone im 2D-TFIM	184
4.57	Ausbreitung lokale Störung entlang Achse im 2D-TFIM	184
C.1	Konvergenz Variationsparameter Grundzustandes 2D-TFIM (Jastrowansatz)	218
C.2	Energie pro Spin / renormierter Betrag Magnetisierung Grundzustand 2D-TFIM	219
C.3	Konvergenz Variationsparameter für Betrag Magnetisierung im Jastrowansatz in der Nähe des Phasenüberganges	220
D.1	Vergleich Freie-Fermionen-Technik / rt-VMC-Verfahren für zeitlichen Verlauf der gleichzeitigen Korrelationsfunktion im 1D-TFIM nach Feldquenchs	222
E.1	Veranschaulichung RES	225
E.2	Beispielkonfiguration 8×8 -System	227
E.3	Algorithmus für RES von $N_{m,n}$, $T_{m,n;m',n'}$	228
E.4	Relativer Fehler von $N_{m,n}$ für 6×6 -System	229
E.5	$t_{m,n;m',n'}$ für 4×4 -System	230
E.6	$t_{m,n;m',n'}$ für 8×8 -System	231
E.7	$t_{m,n;m',n'}$ für 12×12 -System	232
E.8	$t_{m,n;m',n'}$ für 16×16 -System	233
E.9	Minimale Kinkzahl zu vorgegebener Anzahl m an Spin down bei Anordnung der Spin down in Form eines möglichst kompakten Clusters	234

Tabellenverzeichnis

3.1	Zeitintervalle mit Beitrag zur Verschränkungsentropie im 1D-TFXYM mit FRB	69
3.2	Zeitintervalle mit Beitrag zur Verschränkungsentropie im 1D-TFXYM mit PRB	69
3.3	Maximalgeschwindigkeit Quasiteilchen nach Quenchprotokollen im 1D-TFXYM	73
4.1	Unterräume des Hilbertraumes des 3×3 -Systems	137
4.2	Anzahl Variationsparameter rt-VMC-Verfahren für 2D-TFIM nach Feldquenchs	139
4.3	Übergänge zwischen Unterräumen des Hilbertraumes durch Umklapp eines Spins	141
D.1	Anzahl Bereiche mit Spin up / Spin down in 1D-Kette mit PRB	221
E.1	Anzahl Spinkonfigurationen minimaler Kinkzahl mit kompaktem Cluster der Spin down	235

Formel- und Symbolverzeichnis

- Hamiltonoperator eindimensionales transversales XY-Modell

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_i \left\{ \frac{1+\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y \right\} - \frac{h}{2} \sum_i \hat{\sigma}_i^z$$

- J : Kopplungskonstante ($J \geq 0$)
- γ : Anisotropie ($1 \geq \gamma \geq 0$)
 - $\gamma = 1$: Ising-Modell
 - $1 > \gamma > 0$: XY-Modell
 - $\gamma = 0$: XX-Modell
- h : externes transversales Feld ($h \geq 0$)

- Hard-Core-Boseoperatoren

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_i^x + i\hat{\sigma}_i^y) \quad , \quad \hat{a}_i = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_i^x - i\hat{\sigma}_i^y)$$

- Jordan-Wigner-Transformation von Hard-Core-Boseoperatoren auf Fermioperatoren

$$\hat{c}_i^\dagger = \hat{a}_i^\dagger \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right\} \quad , \quad \hat{c}_i = \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right\} \hat{a}_i$$

- Bogoliubov-Rotation (periodische Randbedingungen)

$$\hat{\eta}_k^\dagger = u_{-k} \hat{c}_k^\dagger - v_{-k} \hat{c}_{-k} \quad , \quad \hat{\eta}_k = u_k^* \hat{c}_k + v_k^* \hat{c}_{-k}^\dagger$$

- Diagonalgestalt des Hamiltonoperators nach Transformation auf ein System freier Fermionen

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k - \frac{1}{2} \right)$$

- Energien der Eigenmoden des Hamiltonoperators des eindimensionalen transversalen XY-Modells

$$\Lambda_k = \sqrt{h^2 + J^2 \gamma^2 - 2Jh \cos(k) + J^2 (1 - \gamma^2) \cos^2(k)}$$

- Dichteoperator und Zustandssumme des kanonischen Gibbs-Ensembles (CGE)

$$\hat{\rho}_{\text{CGE}} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z_{\text{CGE}}} \quad \text{mit} \quad Z_{\text{CGE}} = \text{Sp}[e^{-\beta \hat{H}}]$$

- Dichteoperator und Zustandssumme des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles (GGE)

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\tilde{\beta} \hat{H} - \sum_n \lambda_n \hat{I}_n} \quad \text{mit} \quad Z_{\text{GGE}} = \text{Sp}[e^{-\tilde{\beta} \hat{H} - \sum_n \lambda_n \hat{I}_n}] \quad \text{und} \quad [\hat{I}_n, \hat{H}] = 0$$

- Autokorrelationsfunktion

$$C_{\text{auto}}^{xx}(r, t) = C^{xx}(r, t; r, 0) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_r^x(t) \hat{\sigma}_r^x(0) | \Psi_0^{(0)} \rangle$$

- gleichzeitige Korrelationsfunktion

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_{r_1}^x(t) \hat{\sigma}_{r_2}^x(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle$$

- lokale Magnetisierung / lokaler Ordnungsparameter

$$m_\ell^x(t) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_\ell^x(t) | \Psi_1^{(0)} \rangle$$

- Verschränkungsentropie

$$S_\ell(t) = -\text{Sp}\{\hat{\rho}_\ell(t) \ln(\hat{\rho}_\ell(t))\}$$

- Geschwindigkeit der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie

$$v_k = \frac{\partial \Lambda_k}{\partial k} = \frac{J \sin(k)(h - J(1 - \gamma^2) \cos(k))}{\Lambda_k}$$

- Besetzungszahl der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie

$$f_k = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k | \Psi_0^{(0)} \rangle = \frac{1}{2} [1 - \cos(\Delta_k)]$$

mit

$$\cos(\Delta_k) = \frac{(h - J \cos(k))(h_0 - J_0 \cos(k)) + J J_0 \gamma \gamma_0 \sin^2(k)}{\Lambda_k \Lambda_k^{(0)}}$$

- modifizierte Besetzungszahl der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie

$$\tilde{f}_k = -\frac{1}{2} \ln(|\cos(\Delta_k)|)$$

- Besetzungszahl der Quasiteilchen nach Rückquench zum Zeitpunkt t'

$$f_k^{(0)}(t') = \langle \Psi(t') | \hat{\eta}_k^{(0)\dagger} \hat{\eta}_k^{(0)} | \Psi(t') \rangle = \sin^2(\Delta_k) \sin^2(\Lambda_k t')$$

- modifizierte Besetzungszahl der Quasiteilchen nach Rückquench zum Zeitpunkt t'

$$\tilde{f}_k^{(0)}(t') = -\frac{1}{2} \ln(|\cos^2(\Delta_k) + \sin^2(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t')|) = -\frac{1}{2} \ln(|1 - 2 \sin^2(\Delta_k) \sin^2(\Lambda_k t')|)$$

- Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{i,j}^x \{ \hat{\sigma}_{i+1,j}^x + \hat{\sigma}_{i,j+1}^x \} - \frac{h}{2} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{i,j}^z$$

- Ansatzfunktion für den Variations-Monte-Carlo-Algorithmus in der paramagnetischen Phase nach den Wechselwirkungsquenchs (Jastrowansatz)

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}(t) \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \right\} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z$$

- Bewegungsgleichung der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs

$$\sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \delta \hat{C}_{\mathbf{r}'}^{xx} \rangle \dot{\alpha}_{\mathbf{r}'}(t) = -\imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle$$

- Ansatzfunktion für den Variations-Monte-Carlo-Algorithmus in der ferromagnetischen Phase nach den Feldquenchs

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{m,n} \alpha_{m,n}(t) |\Psi_{m,n}\rangle$$

- Bewegungsgleichung der Variationsparameter nach den Feldquenchs

$$\imath \dot{\alpha}_{m',n'}(t) = -J(N - n') \alpha_{m',n'}(t) - \frac{h}{2} \sum_{m,n} t_{m',n';m,n} \alpha_{m,n}(t)$$

1 Einführung zur Nichtgleichgewichtsdynamik

1.1 Motivation: Der Quantencomputer

Quantenmechanische Effekte spielen bei vielen Anwendungen in der modernen Technik eine bedeutende Rolle. Als Beispiele seien der in Festplatten genutzte Riesenmagnetowiderstand (GMR-Effekt), die Supraleitung, der Laser oder das Elektronenmikroskop genannt. Weiterhin haben Kenntnisse der Bandstruktur von Festkörpern die moderne Halbleitertechnik einschließlich des Transistors sowie der Diode und damit das gesamte Digitalzeitalter erst ermöglicht. Darüber hinaus beruhen bildgebende Verfahren in der Medizin auf Basis von Röntgenstrahlung ebenso wie die Magnetresonanztomographie (nuclear magnetic resonance, NMR) ebenso auf quantenphysikalischen Effekten wie die Strahlentherapie. Diese Aufzählung ist weit davon entfernt, vollständig zu sein, liefert jedoch bereits ein Bild davon, wie wichtig die Quantenmechanik für viele mittlerweile als alltäglich empfundene Dinge geworden ist. Dabei ist der Mehrheit der oben genannten Anwendungen gemein, dass bei ihrer Entwicklung und technischen Umsetzung die Konzepte und der mathematische Formalismus der Quantenmechanik, der auf die Formulierung der Matrizenmechanik durch Werner Heisenberg, Max Born und Pascual Jordan [1–3] bzw. die Formulierung der Wellenmechanik durch Erwin Schrödinger [4–7] in den Jahren 1925 und 1926 zurückgeht, nur selten direkt zum Einsatz gekommen sind.

Eine große Ausnahme hiervon bilden Quantencomputer, die aktuell Gegenstand von Forschung und Entwicklung sind. Die Idee des Quantencomputers geht zurück auf Richard Feynman, der bereits 1982 erkannte, dass quantenmechanische Systeme ein bedeutend größeres Potential zur Verarbeitung von Informationen besitzen als die korrespondierenden klassischen Systeme [8]. Drei Jahre später konnte David Deutsch in der Theorie zeigen, dass die Konstruktion eines Quantencomputers möglich ist [9]. Quantencomputer arbeiten auf Basis quantenmechanischer Zustände und nutzen das Superpositionsprinzip sowie quantenmechanische Verschränkung. Die Grundlage des Quantencomputers bilden dabei sogenannte Qubits, die als Analogon zu einem Bit eines klassischen Computers die kleinste Speichereinheit eines Quantencomputers darstellen und durch ein quantenmechanisches Zweizustandssystem realisiert werden können, dessen Zustände durch eine Messung eindeutig voneinander unterscheidbar sind. Mehrere Qubits werden wie bei einem klassischen Computer zu einem Register zusammengefasst, welches als Quantenregister bezeichnet wird. Ein Quantencomputer führt Algorithmen aus, indem er eine programmierbare Abfolge an Gattern auf das initialisierte Quantenregister anwendet. Dieses entwickelt sich daraufhin in einen Endzustand, der das Ergebnis der Rechnung enthält. Die Konstruktion eines Quantencomputers stellt eine große technische Herausforderung dar, da mehrere zum Teil in Konflikt zueinander stehende Anforderungen gleichzeitig erfüllt werden müssen. Hierzu gehören die Präparation des Anfangszustandes, lange Kohärenzzeiten, möglichst universelle Gatteroperationen sowie das Auslesen des Zustandes der Qubits. Da mit Quantencomputern jedoch die Hoffnung verbunden ist, verschiedene physikalische und mathematische Probleme bedeutend schneller und effizienter als mit einem klassischen Computer lösen zu können, erscheinen diese Anstrengungen als gerechtfertigt. Der erste Quantenalgorithmus, der eine Aufgabenstellung nachweislich schneller lösen konnte als ein klassischer Algorithmus und damit die theoretischen Möglichkeiten von Quantencomputern aufzeigte, war der Algorithmus von Deutsch [9], der auch als das Problem von Deutsch bekannt ist und bestimmt, ob eine auf einem Bit operierende Funktion ($f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$) konstant ($f(0) = f(1)$) oder balanciert ($f(0) \neq f(1)$) ist. 1992 wurde die Idee durch Deutsch und Jozsa auf eine beliebige Zahl an Eingabebits verallgemeinert (Deutsch-Jozsa-Algorithmus bzw. Problem von Deutsch und Jozsa) [10]. Der von Deutsch in [9] vorgeschlagene Algorithmus war nicht deterministisch. Seine Erfolgsquote lag bei lediglich 50%. Der Deutsch-Jozsa-Algorithmus aus [10] hingegen war zwar deterministisch, benötigte jedoch im Gegensatz zum Algorithmus von Deutsch zwei Funktionsauswertungen statt nur einer. 1998 wurde der Algorithmus durch Cleve *et al.* weiter verbessert, sodass nur noch eine Funktionsauswertung benötigt wurde und der Algorithmus dennoch deterministisch blieb [11]. Zwei weitere bedeutende Quantenalgorithmen sind der Shor-Algorithmus [12] sowie der Grover-Algorithmus [13–15], die beide vom Deutsch-Jozsa-Algorithmus inspiriert wurden. Der Shor-Algorithmus stellt ein Faktorisierungsverfahren dar und berechnet einen nichttrivialen Teiler einer zusammengesetzten Zahl. Eine erfolgreiche Implementierung auf einem Quantencomputer mit einer großen Anzahl an Qubits (zur Faktorisierung einer Zahl N wird ein Quantencomputer mit $\ln(N)$ Qubits benötigt) wäre ein bedeutender Fortschritt in der Kryptographie, da er nur eine polynomielle Laufzeit aufweist und somit bedeutend schneller arbeitet als alle Faktorisierungsalgorithmen auf einem klassischen Computer. Der Grover-Algorithmus ist ein Quantenalgorithmus zur Suche in einer unsortierten Datenbank. Die Anzahl

der benötigten Schritte ist dabei für eine Datenbank mit N Einträgen von der Ordnung $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ und der Speicherbedarf des Algorithmus ist von der Ordnung $\mathcal{O}(\ln(N))$. Die drei genannten Quantenalgorithmen gehören zu den bedeutendsten Quantenalgorithmen und werden verwendet, um zu überprüfen, ob ein Computer wirklich quantenmechanisch rechnet.

Nachdem es sich bei Quantencomputern über längere Zeit hinweg nur um ein theoretisches Konzept gehandelt hat, konnten 1998 die ersten Quantencomputer in Experimenten realisiert werden. Diese basierten auf der Verwendung von Kernspins als Qubits. Am IBM Almaden Research Center konnten Chuang *et al.* mit einem Quantencomputer den Deutsch-Algorithmus [16] sowie die einfachste Anwendung des Grover-Algorithmus mit vier verschiedenen Zuständen [17] ausführen. Hierzu wurden Chloroformmoleküle (CHCl_3) in einer Lösung verwendet, wobei das betrachtete Molekül durch ein in ihm vorhandenes ^{13}C -Atom gegenüber den anderen Molekülen gekennzeichnet war. Gemessen wurden die Kernspins des Kohlenstoff- und des Wasserstoffatoms des Chloroformmoleküls, sodass sich ein Quantencomputer mit zwei Qubits und somit vier möglichen Zuständen ergeben hat. Im gleichen Jahr wurden durch Jones *et al.* am Oxford Centre for Molecular Sciences mithilfe von Quantencomputern, die ebenfalls auf der Grundlage von NMR funktionierten, der Deutsch-Algorithmus [18] und der Grover-Algorithmus [19] ausgeführt. Im Jahre 2001 konnte wiederum am IBM Almaden Research Center und wiederum auf der Grundlage von NMR durch Vandersypen *et al.* auf Basis eines Perfluorobutadienyl-Eisen-Komplexes erstmals ein Quantencomputer realisiert werden, der 7 Qubits umfasste und den Shor-Algorithmus ausführte [20].

Eine andere mögliche Realisierung eines Quantencomputers wurde 1995 an der Universität Innsbruck durch Cirac und Zoller vorgeschlagen [21]. Hierbei handelte es sich um einen Quantencomputer auf Basis kalter Ionen gefangen in einer linearen Falle, die mit Laserstrahlen manipuliert werden können. Die Erzeugung von Quantengattern erfolgt dabei durch Kopplung der Ionen. Monroe *et al.* gelang im gleichen Jahr am National Institute of Standards and Technology (NIST) die von Cirac und Zoller theoretisch beschriebene Erzeugung eines controlled NOT-Gatters (CNOT) [22], bei dem es sich um ein universelles logisches Quantengatter handelt. Die zu seiner Erzeugung notwendigen zwei Qubits waren dabei in inneren und äußeren Freiheitsgraden eines einzelnen gefangenen Atoms gespeichert, das durch Laser gekühlt wurde. Die Realisierung eines funktionsfähigen Quantencomputers nach der Beschreibung von Cirac und Zoller gelang wiederum an der Universität Innsbruck am Institut für Experimentalphysik. Im Jahre 2003 konnte ein auf in Ionenfallen gespeicherten $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen basierender Quantencomputer realisiert werden, der den Deutsch-Jozsa-Algorithmus ausführte [23]. Brickman *et al.* gelang 2005 an der Universität von Michigan die Ausführung des Grover-Algorithmus auf einem Quantencomputer aus zwei in einer Falle gefangenen $^{111}\text{Cd}^+$ -Ionen [24]. In weiteren Experimenten an der Universität Innsbruck gelang 2005 erstmals die Erzeugung eines Quantenregisters aus 8 verschränkten Qubits, welche wiederum durch gefangene $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen realisiert wurden [25]. Die Anzahl der $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen im Quantenregister konnte bis 2011 auf 14 gesteigert werden. Ebenfalls 2011 konnte durch Ospelkaus *et al.* am NIST gezeigt werden, dass in einer Falle gefangene Ionen auch mittels Mikrowellen für den Einsatz in einem Quantencomputer verschränkt werden können und somit nicht zwangsweise komplexe, raumfüllende Lasersysteme erforderlich sind, sondern auch miniaturisierte Mikrowellenelektronik dafür ausreichend ist [26].

Von größerer Bedeutung als die bisher genannten Konzepte eines Quantencomputers, insbesondere für technische Anwendungen, sind jedoch Realisierungen von Quantencomputern auf einem Chip. Die Erzeugung des ersten Quantenprozessors aus einem Festkörper gelang DiCarlo *et al.* im Jahre 2009 an der Yale University in New Haven [27]. Der supraleitende Quantenprozessor hatte eine Größe von 7×2 mm und wurde bei 13 mK betrieben. Er umfasste zwei Qubits, die jeweils aus einer Milliarde Aluminiumatomen bestanden. Die Aluminiumatome jedes Qubits verhielten sich dabei wie ein einzelnes Atom, das zwei Zustände annehmen kann. Im gleichen Jahr konnten Politi *et al.* von der Universität Bristol einen auf optischen Schaltkreisen basierenden Quantenprozessor mit vier Qubits auf einem Silica-on-Silicon-Chip erzeugen, der den Shor-Algorithmus ausführen konnte [28]. Im Jahre 2011 schließlich wurde von D-Wave-Industries der erste kommerzielle Quantencomputer vorgestellt. D-Wave One umfasste 128 Qubits. Auch wenn sich der Prozessor der Kritik ausgesetzt sah, dass er kein echter Quantenprozessor sei, konnten in [29] zumindest einige Quanteneigenschaften nachgewiesen werden. Die Nachfolgemodelle D-Wave Two und D-Wave 2X aus den Jahren 2013 und 2015 umfassten bereits 512 bzw. 1152 Qubits. Die Prozessoren sind supraleitend mit Betriebstemperaturen von wenigen mK (15 mK im Falle von D-Wave 2X) und zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme ausgelegt. Erworben wurden sie bislang von Lockheed Martin (D-Wave One, D-Wave Two, D-Wave 2X), einem Konsortium von Google, der NASA und der URSA (D-Wave Two, D-Wave 2X) sowie dem Los Alamos National Laboratory (D-Wave 2X).

Trotz der sehr vielfältigen beschriebenen Konzepte zur Realisierung eines Quantencomputers sind die

zugrundeliegenden Konzepte immer die gleichen. Um die Funktionsweise und möglichen technischen Schwierigkeiten eines Quantencomputers zu verstehen, werde im Folgenden zunächst ein einzelnes Qubit betrachtet. Seien $|0\rangle$ und $|1\rangle$ zwei Zustände, die eine Basis des zweidimensionalen Hilbertraumes des Qubits bilden. Dabei sind $|0\rangle$ und $|1\rangle$ nicht notwendigerweise orthogonal zueinander und der Erwartungswert der Energie in $|1\rangle$ sei höher als in $|0\rangle$. Der Zustand des Qubits kann dann allgemein in der Form

$$|\Psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle \quad \text{mit} \quad c_0, c_1 \in \mathbb{C} \quad \text{und} \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1 \quad (1.1)$$

geschrieben werden. Diese Möglichkeit von Superpositionszuständen stellt den entscheidenden Unterschied zwischen einem Quantencomputer und einem klassischen Computer dar. Um nun aufwändigere Algorithmen durchführen zu können, werden mehrere Qubits zu einem Quantenregister zusammengefasst. Sei N die Anzahl der Qubits des Quantenregisters. Der Hilbertraum des Quantenregisters ergibt sich dann als direktes Produkt der Hilberträume der einzelnen Qubits und ist von der Dimension 2^N . Als Basis des Hilbertraumes des Quantenregisters wird die Menge $\{|n_1 n_2 \dots n_{N-1} n_N\rangle\}$ mit $n_i \in \{0, 1\}$ der Produktzustände verwendet. Der Zustand des Quantenregisters kann dabei eine beliebige Überlagerung aller Basiszustände des Produkthilbertraumes sein im Gegensatz zu einem Register in einem klassischen Computer, in dem jedes Bit den definierten Wert 0 oder 1 hat. Hieraus ergibt sich die Existenz verschränkter Zustände, d. h. von Zuständen, die nicht als direktes Produkt der Zustände der einzelnen Qubits des Quantenregisters geschrieben werden können. Ein Beispiel für einen solchen verschränkten Zustand eines Quantenregisters aus zwei Qubits ist $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$.

Zur Erläuterung zweier Effekte, die die Funktionsweise eines Quantencomputers beeinträchtigen können, werde nun wieder ein einzelnes Qubit betrachtet. Da ein Qubit niemals vollständig von seiner Umgebung isoliert werden kann, wird sich im Laufe des Zeit Dekohärenz ergeben. Hierunter ist zu verstehen, dass die Superposition verschwindet und das Qubit mit durch $|c'_0|^2$ bzw. $|c'_1|^2$ gegebenen Wahrscheinlichkeiten im Zustand $|0\rangle$ bzw. $|1\rangle$ angetroffen wird. Das Qubit geht somit von dem anfänglichen reinen Zustand $|\Psi\rangle$ mit der Dichtematrix

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = |c_0|^2 |0\rangle\langle 0| + |c_1|^2 |1\rangle\langle 1| + c_0^* c_1 |0\rangle\langle 1| + c_0 c_1^* |1\rangle\langle 0| \quad (1.2)$$

in einen gemischten Zustand mit der Dichtematrix

$$\hat{\rho}' = |c'_0|^2 |0\rangle\langle 0| + |c'_1|^2 |1\rangle\langle 1| \quad (1.3)$$

über. Dabei ist $|c'_0|^2 + |c'_1|^2 = 1$, aber nicht notwendigerweise $|c'_0|^2 = |c_0|^2$ bzw. $|c'_1|^2 = |c_1|^2$. Das Qubit verhält sich nach Verlust der Kohärenz wie ein klassisches Bit. Die Dekohärenzzeit, d. h. die Zeit, bis der Zustand des Qubits seine Kohärenz verloren hat, hängt dabei entscheidend davon ab, wie gut das System gegenüber seiner Umgebung isoliert ist. Der Verlust der Kohärenz ist ein Problem, das ausschließlich Quantencomputer betrifft.

Neben dem Verlust der Kohärenz muss für den Zustand eines Qubits auch Relaxation berücksichtigt werden. Hierunter ist zu verstehen, dass ein System bestrebt ist, seine Energie zu minimieren, indem es einen energetisch möglichst niedrigen Zustand einnimmt. Dies wurde oben bereits durch $c_0 \rightarrow c'_0$ und $c_1 \rightarrow c'_1$ angedeutet. Sofern das Qubit nicht perfekt gegenüber seiner Umgebung isoliert ist und es Energie an diese abgeben kann, wird die Wahrscheinlichkeit, es im energetisch höheren Zustand $|1\rangle$ vorzufinden, mit der Zeit abnehmen. Doch selbst bei einer perfekten Isolierung wird sich eine zeitabhängige Wahrscheinlichkeit ergeben, das Qubit in den Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ vorzufinden, sofern diese keine Eigenzustände des Hamiltonoperators darstellen. Diese Zeitentwicklung wird als Nichtgleichgewichtsdynamik bezeichnet. Werden mehrere Qubits zu einem Quantenregister zusammengefasst, so verkompliziert sich die Situation noch weiter, da nun im Falle von Wechselwirkung zwischen den Qubits die Zeitentwicklung eines jeden Qubits nicht mehr individuell bestimmt werden kann, sondern immer die Zeitentwicklung des gesamten Quantenregisters als ein quantenmechanisches Vielteilchensystem bestimmt werden muss. Das Verständnis der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme ist somit von entscheidender Bedeutung, um einen funktionsfähigen Quantencomputer realisieren und die in einem Quantenregister gespeicherten Resultate der Rechnung des Quantencomputers korrekt auslesen zu können. Der das Quantenregister beschreibende Hamiltonoperator hängt dabei von der konkreten Realisierung des Quantencomputers ab.

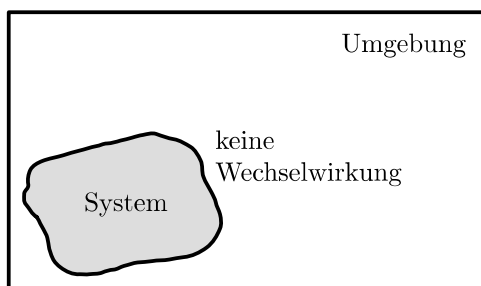
1.2 Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme

Neben der im vorangegangenen Abschnitt erläuterten Bedeutung der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme für Quantencomputer stellt ihre Erforschung auch abseits dieser konkreten Anwendung einen Forschungsschwerpunkt der Quantenphysik dar, der viele neue und zum Teil überraschende Erkenntnisse hervorgebracht und zum tiefergehenden Verständnis der Quantenmechanik und ihrer Beziehung zur klassischen Physik beigetragen hat. In den vergangenen Jahren wurde die Nichtgleichgewichtsdynamik einer Vielzahl quantenmechanischer Vielteilchensysteme untersucht. Im Fokus theoretischer Studien standen dabei vor allem Standardmodelle wie das Ising-Modell [30–62], das XY-Modell [31, 36, 63–68], das XX-Modell [31, 69], das Heisenberg-Modell (XXZ-Modell) [70–81], das Hubbard-Modell [82–90] sowie das Bose-Hubbard-Modell [58, 60, 91–102]. Die Untersuchungen haben sich jedoch nicht auf diese beschränkt, sondern neben den genannten Standardmodellen wurden auch das Luttinger-Modell [103, 104], das Sine-Gordon-Modell [105], Hard-Core-Bosonen [106–111] bzw. korrelierte Fermionen auf einem Gitter [112, 113], freie Bosonen [114], das Falicov-Kimball-Modell [115], das Landau-Ginzburg-Modell [116], das Aubry-André-Modell [117], das Lieb-Liniger-Modell [77], das q-Bosonen-Modell [118], das Bose-Gas [119] sowie verschiedene feldtheoretische Modelle [120–125] untersucht. Review-Artikel zum aktuellen Stand der Forschung in Bezug auf die Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme können beispielsweise in [126–128] gefunden werden.

Dank des technischen Fortschrittes sind die Studien zur Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme heutzutage nicht mehr auf theoretische Untersuchungen beschränkt, sondern es ist mittlerweile möglich, entsprechende von ihrer Umgebung isolierte Systeme unter Laborbedingungen zu erzeugen und gezielt zu manipulieren. Dies erlaubt einerseits, Vorhersagen der theoretischen Studien zu überprüfen, hat andererseits aber auch zu neuen Erkenntnissen geführt, welche Änderungen der theoretischen Beschreibungen und Modelle erforderlich gemacht haben. Neben den bereits besprochenen experimentellen Realisierungen von Quantencomputern auf Grundlage von in Ionenfallen gefangenen $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen am Institut für Experimentalphysik der Universität Innsbruck [23, 25] bzw. $^{111}\text{Cd}^+$ -Ionen an der Universität von Michigan [24] wurden in [129] durch Porras und Cirac sowie in [130] durch Friedenauer *et al.* Quantenmagnete mithilfe gefangener Ionen simuliert. Kim *et al.* konnten 2011 mithilfe in Ionenfallen gefangener $^{171}\text{Yb}^+$ -Ionen das transversale Ising-Modell simulieren [131]. Weiterhin gelang Jurcevic *et al.* im Jahre 2014 in [132] die experimentelle Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik des eindimensionalen transversalen Ising-Modells mit langreichweitiger Wechselwirkung mithilfe gefangener $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen. Ein Review-Artikel über Quantensimulation auf Grundlage gefangener Ionen kann in [133] gefunden werden.

Neben in elektromagnetischen Fallen gefangenen Ionen haben optische Fallen für die experimentelle Realisierung quantenmechanischer Vielteilchensysteme eine große Bedeutung erlangt, da Sie auch das Einfangen neutraler Atome sowie eine nahezu perfekte Isolation der in ihnen gefangenen Atome von der Umgebung erlauben. Auf diese Weise wird die wichtigste Quelle von Dekohärenz innerhalb des Systems eliminiert und bei der Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik können lange Zeiten erreicht werden. Das Einfangen von Atomen in optischen Fallen gelang erstmalig 1998 durch Anderson und Kasevich [134].

(a) Isoliertes System



(b) Offenes System

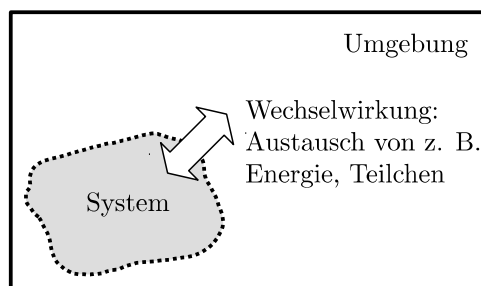


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung (a) eines gegenüber seiner Umgebung isolierten Systems und (b) eines offenen Systems, das mit seiner Umgebung wechselwirkt, beispielsweise durch Austausch von Energie und Teilchen.

Im Folgenden wurden beispielsweise die Zeitentwicklung von Bose-Einstein-Kondensaten [135, 136], von Fermigasen [137–140] sowie des Bose-Hubbard-Modells [141, 142] untersucht. Letzteres wurde dabei in den genannten Referenzen jeweils durch ^{87}Rb -Atome in einem optischem Gitter realisiert.

Die theoretischen Betrachtungen der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme erfolgen in der Regel am Temperaturnullpunkt und die Systeme werden als perfekt isoliert gegenüber ihrer Umgebung angenommen. Die Unterschiede zwischen isolierten Systemen und solchen, die mit ihrer Umgebung in Wechselwirkung stehen, sind in Abbildung 1.1 veranschaulicht. Bedingt durch die Isolation treten keine Dekohärenzeffekte auf und die Gesamtenergie des Systems ist zeitlich erhalten. Experimentelle Untersuchungen haben das Ziel, diesem Ideal möglichst nahe zu kommen. Um beispielsweise Vielteilchensysteme aus Atomen bei tiefen Temperaturen aufzubauen, haben sich optische Fallen in Verbindung mit einer Laserkühlung bewährt. Während die Atome wie bereits erläutert wurde durch die optische Falle sehr gut gegenüber ihrer Umgebung isoliert sind, erlaubt die Kühlung durch Laser das Erreichen von Temperaturen im Bereich weniger mK.

Sowohl die theoretischen Rechnungen als auch die Experimente zur Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme haben zum Teil neue und unerwartete Effekte offenbart. Hierzu gehören beispielsweise *dynamische Phasenübergänge* [50, 56, 84, 85, 87, 116, 143–146]. Ein dynamischer Phasenübergang bezeichnet ein nichtanalytisches Verhalten in der Zeitentwicklung eines Systems außerhalb des Gleichgewichts. Ein weiteres interessantes Phänomen stellt *Präthermalisierung* dar [53, 82, 86, 146, 147]. Der Begriff wurde von Berges *et al.* in [148] geprägt und bezeichnet das Vorhandensein eines Zeitintervalls in der Zeitentwicklung des Systems, während dessen sich das System in einem quasistationären Zustand befindet, in dem einige, jedoch nicht alle Observablen mit thermischen Erwartungswerten übereinstimmen. Zu späteren Zeiten erfolgt unter Umständen ein Übergang in einen thermischen Zustand. Ob dieser Übergang auftritt, hängt unter anderem von den Erhaltungsgrößen des Systems ab. Ein Review-Artikel über Präthermalisierung kann in [149] gefunden werden. Schließlich konnte noch gezeigt werden, dass für bestimmte quantenmechanische Vielteilchensysteme der Relaxationsprozess im Rahmen semiklassischer Theorien mithilfe sich ballistisch durch das System bewegender Quasiteilchen beschrieben werden kann. Zu diesen Systemen gehören beispielsweise das eindimensionale transversale Ising-Modell [43, 45] sowie das eindimensionale transversale XY-Modell [68]. Bei den Quasiteilchen der semiklassischen Theorie handelt es sich für diese beiden Modelle in der ferromagnetischen Phase um gebrochene Kopplungen zwischen den Spins. Auf das eindimensionale transversale Ising- und XY-Modell sowie die semiklassische Beschreibung ihrer Nichtgleichgewichtsdynamik wird im weiteren Verlauf der vorliegenden Dissertation noch detailliert eingegangen werden. Der Relaxationsprozess des Bose-Hubbard-Modells kann ebenfalls semiklassisch beschrieben werden. Die Ausbreitung einer Störung in Form von Quasiteilchen konnte durch Chenau *et al.* in [141] an einem eindimensionalen ultrakalten Gas bosonischer Atome in einem optischen Gitter, das in in der Mott-isolierenden Phase mit einfacher Besetzung jedes Gitterplatzes betrachtet wurde, auch experimentell nachgewiesen werden. Bei den Quasiteilchen der semiklassischen Theorie für das Bose-Hubbard-Modell handelt es sich um Doublonen (doppelt besetzte Gitterplätze) und Holonen (unbesetzte Gitterplätze). Ihre Erzeugung und Bewegung durch das System sind in Abbildung 1.2 dargestellt.

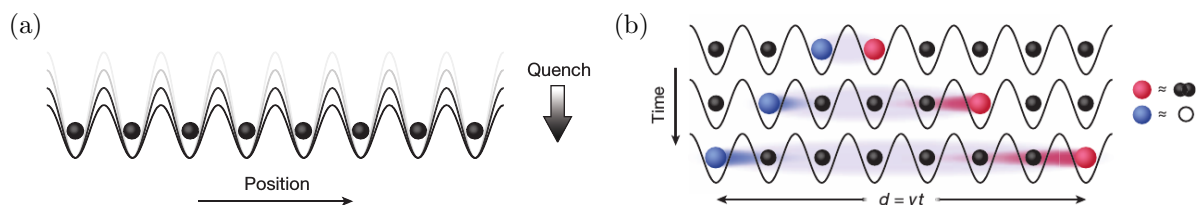


Abbildung 1.2: (a) Ein eindimensionales ultrakaltes Gas bosonischer Atome in einem optischen Gitter mit einfacher Besetzung eines jeden Gitterplatzes, beschrieben durch den Hamiltonoperator des Bose-Hubbard-Modells, wird zu Beginn in einem Zustand tief in der Mott-isolierenden Phase präpariert. Durch instantane Änderung der Tiefe des Gitters (Quench) wird das System aus dem Gleichgewicht gebracht. (b) Nach dem Quench entstehen an jedem Gitterplatz verschränkte Paare von Quasiteilchen, die jeweils aus einem Doublon und einem Holon bestehen, die sich in entgegengesetzter Richtung ballistisch durch das System bewegen mit der konstanten Geschwindigkeit $v/2$. Die Abbildungen wurden aus [141] entnommen. Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: *Nature* **481**, 484–487, copyright 2012.

Neben der experimentellen Beobachtung der Ausbreitung einer Störung im Bose-Hubbard-Modell in Form von Quasiteilchen konnte in [132] durch Jurcevic *et al.* Quasiteilchendynamik auch in einem Vielteilchensystem bestehend aus Ionen in einer Falle, dessen Hamiltonoperator dem des eindimensionalen transversalen Ising-Modells mit langreichweitigen Wechselwirkungen entsprach, beobachtet werden.

1.2.1 Zentrale Fragestellungen der Nichtgleichgewichtsdynamik

Nach dem kurzen Überblick über den Stand der Forschung der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme, werde sich nun den physikalischen Grundlagen der Untersuchungen zugewandt. Hierzu wird ein isoliertes quantenmechanisches Vielteilchensystem betrachtet, welches zum Zeitpunkt t_0 aus dem Gleichgewicht gebracht wird. Auf Möglichkeiten, das System aus dem Gleichgewicht zu bringen, wird später eingegangen werden. Nachdem das System aus dem Gleichgewicht gebracht wurde, entwickelt sich sein Zustand unter der Wirkung des Hamiltonoperators \hat{H} unitär in der Zeit gemäß der Schrödinger-Gleichung

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\Psi(t_0)\rangle . \tag{1.4}$$

Unter der unitären Zeitentwicklung ist die Gesamtenergie des Systems erhalten und ein anfänglich reiner Zustand bleibt aufgrund fehlender Dekohärenz für alle Zeiten ein reiner Zustand. Ziel sowohl der theoretischen als auch der experimentellen Untersuchungen der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme ist die Beantwortung der folgenden zwei Fragen:

- (i) Wie breitet sich ein Signal durch das System aus?
- (ii) Wie sieht der stationäre Zustand des Systems aus?

Die erste Fragestellung befasst sich unter anderem damit, mit welcher Geschwindigkeit sich ein Signal durch das System ausbreitet. Bei dem Signal kann es sich beispielsweise um eine lokale Störung des Anfangszustandes des Systems handeln. Lieb und Robinson konnten in [150] zeigen, dass für quantenmechanische Vielteilchensysteme, deren Hamiltonoperator nur Terme mit Wechselwirkungen endlicher Reichweite enthält, eine obere Schranke für die Geschwindigkeit existiert, die sogenannte *Lieb-Robinson Bound* (LRB). Der Wert der LRB muss für jedes System separat bestimmt werden und wird von den Parametern seines Hamiltonoperators abhängen. Weitere Erläuterungen zur LRB finden sich beispielsweise in [151]. Neben der Geschwindigkeit eines Signals ist in höherdimensionalen Systemen auch die Metrik von Bedeutung, der die Signalausbreitung durch das System folgt. Während sich in kontinuierlichen Systemen eine Störung gemäß der euklidischen Metrik ausbreitet, findet für Gittermodelle die Manhattan-Metrik Anwendung, d. h. die Störung kann sich nur entlang Kopplungen zwischen Gitterplätzen fortpflanzen und Abstände zwischen Positionen werden in Einheiten der Gitterkonstante gemessen. In Abbildung 1.3 ist die Messung von Abständen gemäß der Manhattan-Metrik und der euklidischen Metrik dargestellt.

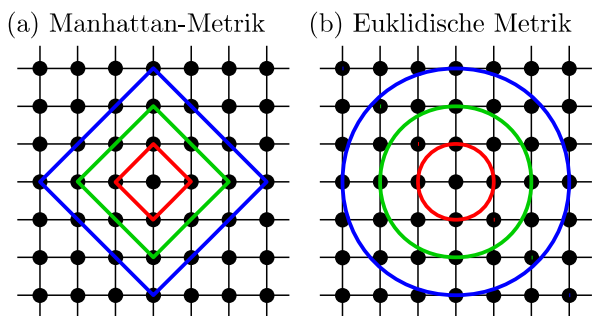


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der Bestimmung von Abständen (a) gemäß der Manhattan-Metrik und (b) gemäß der euklidischen Metrik. Hierbei bezeichnet $\color{red}{-}$ einen Abstand von 1 vom Mittelpunkt, $\color{green}{-}$ einen Abstand von 2 und $\color{blue}{-}$ einen Abstand von 3. Während Positionen gleichen Abstandes nach der Manhattan-Metrik auf einem um $\pi/2$ gegenüber den Gitterachsen gedrehten Quadrat liegen, liegen Positionen gleichen Abstandes nach der euklidischen Metrik auf einem Kreis.

Die beschriebene Unterscheidung zwischen einem Kontinuum und einem Gittermodell erscheint auf den ersten Blick offensichtlich, jedoch ist andererseits bekannt, dass sich ein Gitter auf Abständen, die bedeutend größer als seine Gitterkonstante sind, zunehmend wie ein Kontinuum verhält. Die Untersuchung, bis zu welchen Längenskalen die Manhattan-Metrik anzuwenden ist und ab wann die Beschreibung der Ausbreitung der Störung auch auf einem Gitter mithilfe der euklidischen Metrik erfolgen kann, ist somit von besonderem Interesse.

Die Zielsetzung der zweiten Fragestellung besteht darin, einen Zusammenhang zwischen quantenmechanischen Vielteilchensystemen außerhalb des Gleichgewichts und der statistischen Physik zu finden. Zu diesem Zweck wird das System auf Equilibrierung untersucht und Erwartungswerte der Observablen des Systems im stationären Zustand werden mit ihren Erwartungswerten in Ensembles der statistischen Physik verglichen. Von besonderer Bedeutung ist hierbei die Beantwortung der Frage, ob das System thermalisiert, d. h. ob sein stationärer Zustand durch das kanonische Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann. Die Temperatur des entsprechenden Systems im thermischen Gleichgewicht wird dabei durch die Energie des Systems oberhalb seiner Grundzustandsenergie bestimmt.

1.2.2 Quenchprotokoll

Nach Klärung der Fragestellungen, die durch die Untersuchungen der Nichtgleichgewichtsdynamik quantenmechanischer Vielteilchensysteme zu beantworten sind, werde nun darauf eingegangen, wie die Systeme aus dem Gleichgewicht gebracht werden können. Eine einfache Möglichkeit hierzu stellt ein *Quench* dar. Bei diesem handelt es sich um die instantane Änderung eines oder mehrerer Parameter des Hamiltonoperators des Systems. Im Rahmen der vorliegenden Dissertation werden Quenchprotokolle der folgenden Form betrachtet:

- $t < t_0$:

Vor dem Quench ist das System im Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 mit der Energie $E_0^{(0)}$ präpariert.

- $t = t_0$:

Der Hamiltonoperator des Systems wird durch den Quench instantan von seinem initialen Wert \hat{H}_0 hin zu seinem finalen Wert \hat{H} geändert.

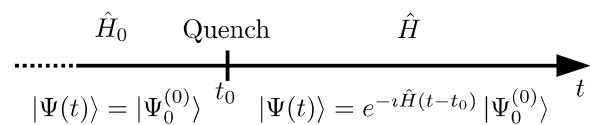
- $t > t_0$:

Der Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 stellt im Allgemeinen keinen Eigenzustand des finalen Hamiltonoperators \hat{H} nach dem Quench dar, sodass sich der Zustand des Systems nach dem Quench gemäß der Schrödingergleichung unitär in der Zeit entwickelt:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\Psi_0^{(0)}\rangle .$$

In Abbildung 1.4 ist das Quenchprotokoll schematisch dargestellt.

Abbildung 1.4: Schematische Darstellung des Quenchprotokolls. Vor dem Quench $\hat{H}_0 \rightarrow \hat{H}$ zum Zeitpunkt t_0 befindet sich das System im Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 . Nach dem Quench entwickelt sich der Zustand des Systems gemäß der Schrödinger-Gleichung unter der Wirkung des finalen Hamiltonoperators \hat{H} .



In Bezug auf die Änderung der Parameter des Hamiltonoperators durch das Quenchprotokoll ist zwischen globalen und lokalen Quenchs zu unterscheiden. Während durch globale Quenchs die Parameter des Hamiltonoperators an jeder Position des Systems auf die gleiche Weise geändert werden, betreffen lokale Quenchs nur die Parameter des Hamiltonoperators für einen Teil des Systems.

Energieänderung durch den Quench

Im Allgemeinen erhöht oder erniedrigt ein Quench die Gesamtenergie des Systems und verschiebt seine Grundzustandsenergie. Für die Gesamtenergie E des Systems nach dem Quench gilt

$$E = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{H} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 E_{\lambda} . \tag{1.5}$$

Dabei ist $c_{\lambda,0} = \langle \Psi_\lambda | \Psi_0^{(0)} \rangle$ und $\sum_\lambda |c_{\lambda,0}|^2 = 1$. Die $|\Psi_\lambda\rangle$ sind die Eigenzustände des finalen Hamiltonoperators \hat{H} und E_λ die zugehörigen Eigenenergien. Die Änderung ΔE der Gesamtenergie des Systems durch den Quench ist dann gegeben durch

$$\Delta E = E - E_0^{(0)}. \quad (1.6)$$

Von größerer Bedeutung als die Änderung ΔE der Gesamtenergie ist die Energie im System oberhalb der neuen Grundzustandsenergie nach dem Quench. Diese Energie wird als *Exzessenergie* E_{exz} bezeichnet mit

$$E_{\text{exz}} = E - E_0. \quad (1.7)$$

Bei ihr handelt es sich um die Energie, die den Relaxationsprozess des Systems nach dem Quench antreibt. Wie Gleichung (1.7) entnommen werden kann, ist die Exzessenergie niemals negativ. Demgegenüber kann die Änderung ΔE der Gesamtenergie des Systems durch den Quench sowohl positiv als auch negativ sein.

1.2.3 Zeitentwicklung in der Energieeigenbasis

Nach der Beschreibung des Verfahrens, um das System aus dem Gleichgewicht zu bringen, gilt es nun, seine Zeitentwicklung zu bestimmen. In der Eigenbasis des die Zeitentwicklung steuernden Hamiltonoperators können die Zeitentwicklung des Zustandes des Systems sowie die Zeitentwicklung von Erwartungswerten von Observablen unmittelbar angegeben werden, da in dieser Basis die Wirkung des Zeitentwicklungsoperators auf alle Zustände bekannt ist. Dieses Vorgehen erfordert jedoch die Kenntnis aller Eigenzustände und der zugehörigen Eigenwerte des Hamiltonoperators, was im Allgemeinen mit der numerischen Diagonalisierung des Hamiltonoperators verbunden ist, sofern die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenzustände des Hamiltonoperators nicht analytisch möglich ist. Da in vielen quantenmechanischen Vielteilchensystemen die Dimension des Hilbertraumes mit der Systemgröße schnell anwächst, ist die numerische Diagonalisierung des Hamiltonoperators in der Regel nur für kleine Systeme möglich. Auch wenn die folgenden Betrachtungen somit unter Umständen für ein betrachtetes System in der dargestellten Form nicht durchführbar sind, so tragen sie doch entscheidend zum Verständnis des stationären Zustandes des Systems bei.

Zur Beschreibung der Zeitentwicklung in der Eigenbasis des finalen Hamiltonoperators \hat{H} nach dem Quench wird der Anfangszustand des Systems zum Zeitpunkt t_0 , d. h. im Falle der beschriebenen Quenchprotokolle der Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 vor dem Quench, in der Basis der Eigenzustände von \hat{H} entwickelt. Im Allgemeinen wird dabei ein nicht verschwindender Überlapp zu einer großen Anzahl an Eigenzuständen des finalen Hamiltonoperators bestehen. Es ergibt sich für die Zeitentwicklung des Zustandes des Systems

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\lambda c_{\lambda,0} e^{-iE_\lambda(t-t_0)} |\Psi_\lambda\rangle. \quad (1.8)$$

Für die Zeitentwicklung des Erwartungswertes eines Operators $\hat{\mathcal{O}}$ folgt damit

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t := \langle \Psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \Psi(t) \rangle = \sum_\lambda |c_{\lambda,0}|^2 \mathcal{O}_{\lambda\lambda} + \sum_{\lambda \neq \lambda'} c_{\lambda,0}^* c_{\lambda',0} e^{i(E_\lambda - E_{\lambda'})(t-t_0)} \mathcal{O}_{\lambda\lambda'}, \quad (1.9)$$

wobei $\mathcal{O}_{\lambda\lambda'} := \langle \Psi_\lambda | \hat{\mathcal{O}} | \Psi_{\lambda'} \rangle$. Der Diagonalanteil ist zeitunabhängig, während der Nichtdiagonalanteil im Falle nicht entarteter Energieeigenwerte aus einer Überlagerung harmonischer Schwingungen mit unterschiedlichen Amplituden und Frequenzen besteht. Sind hingegen Energieeigenwerte entartet, so ergeben sich auch aus dem Nichtdiagonalanteil zeitunabhängige Beiträge. Die zeitunabhängigen Anteile bestimmen das Verhalten des Systems im stationären Zustand. Bei Mittelung des zeitabhängigen Erwartungswertes in (1.9) über das Zeitintervall $[t_0, t_0 + \Delta t]$ und anschließender Normierung auf die Intervalllänge Δt verbleibt im Grenzfall unendlich langer Zeiten und Nichtentartung der Energieeigenwerte nur der Diagonalanteil:

$$\bar{\mathcal{O}} := \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t = \sum_\lambda |c_{\lambda,0}|^2 \mathcal{O}_{\lambda\lambda}. \quad (1.10)$$

Dies bedeutet, dass ein System mit nicht entarteten Energieeigenwerten im stationären Zustand durch das sogenannte *Diagonaleensemble* beschrieben werden kann. Es ist

$$\bar{\mathcal{O}} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\text{diag}} = \text{Sp} \left\{ \hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{\text{diag}} \right\} \quad (1.11)$$

mit dem Dichteoperator

$$\hat{\rho}_{\text{diag}} = \sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 |\Psi_{\lambda}\rangle\langle\Psi_{\lambda}|. \quad (1.12)$$

Sind hingegen Energieeigenwerte entartet, so ergeben sich aufgrund der Zeitunabhängigkeit einzelner Summanden des Nichtdiagonalanteils zusätzliche Beiträge zum Erwartungswert einer Observablen im stationären Zustand des Systems:

$$\bar{\mathcal{O}} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t = \sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 \mathcal{O}_{\lambda\lambda} + \sum_{\substack{\lambda \neq \lambda' \\ E_{\lambda} = E_{\lambda'}}} c_{\lambda,0}^* c_{\lambda',0} \mathcal{O}_{\lambda\lambda'} = \text{Sp} \left\{ \hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{\text{diag}'} \right\} \quad (1.13)$$

mit dem Dichteoperator

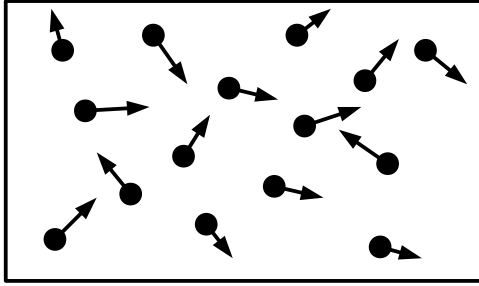
$$\hat{\rho}_{\text{diag}'} = \sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 |\Psi_{\lambda}\rangle\langle\Psi_{\lambda}| + \sum_{\substack{\lambda \neq \lambda' \\ E_{\lambda} = E_{\lambda'}}} c_{\lambda,0}^* c_{\lambda',0} |\Psi_{\lambda'}\rangle\langle\Psi_{\lambda}|. \quad (1.14)$$

In beiden Fällen ergibt sich durch die Zeitmittelung ein gemischter Zustand, wie durch Bestimmung der Spur des Quadrates der Dichteoperatoren gezeigt werden kann. Es stellt sich nun die Frage, ob für die betrachteten Modelle und Quenchprotokolle der stationäre Zustand des Systems mit einem bekannten Ensemble der statistischen Physik beschrieben werden kann.

1.2.4 Stationärer Zustand

Eine fundamentale Hypothese der statistischen Physik stellt die Übereinstimmung von Zeit- und Ensemblemittel dar. Die Untersuchung dieser Hypothese erfolgt im Rahmen der *Ergodentheorie*, die auf die Arbeiten von Ludwig Boltzmann zur statistischen Theorie der Wärme zurückgeht. Bei dem Ensemblemittel handelt es sich um den Mittelwert einer Messgröße über alle Elemente eines Ensembles, der zu einem festen Zeitpunkt über alle möglichen Zustände des Systems gewichtet mit der korrekten Verteilungsfunktion berechnet wird. Demgegenüber steht das Zeitmittel, welches durch Aufintegrieren der betrachteten Größe über ein Zeitintervall $[t_0, t_0 + \Delta t]$ und anschließende Normierung auf die Intervalllänge Δt gebildet wird. Zeit- und Ensemblemittel sind für ein ergodisches System im Grenzfall unendlich langer Zeiten gleich. Hierbei ist zwischen *streng ergodischen* und *schwach ergodischen* Systemen zu unterscheiden. Ein System heißt streng ergodisch, wenn neben dem Zeit- und Ensemblemittel auch alle höheren Momente der Verteilung übereinstimmen. Insbesondere besteht bei streng ergodischen Systemen keine Abhängigkeit vom Anfangszustand, d. h. das System verliert unter der Zeitentwicklung die Erinnerung an diesen. Dieser Verlust der Erinnerung ist verknüpft mit dem Auftreten von Chaos. Streng ergodischen Systemen stehen schwach ergodische Systeme gegenüber, bei denen nur das Zeit- und das Ensemblemittel sowie die Standardabweichung übereinstimmen und höhere Momente der Verteilung nicht berücksichtigt werden. Eine Folge der Ergodizität eines Vielteilchensystems ist, dass es *thermalisiert* und sein zeitlicher Mittelwert somit mit dem Ensemblemittel für das *kanonische Gibbs-Ensemble* (Canonical Gibbs Ensemble, CGE, nach Josiah Willard Gibbs) übereinstimmt. Das kanonische Gibbs-Ensemble beschreibt ein System, welches sich im thermischen Gleichgewicht mit einem Bad befindet, mit dem ein Energieaustausch, aber kein Teilchenaustausch möglich ist. Ist darüber hinaus ein Teilchenaustausch möglich, so spricht man vom *großkanonischen Ensemble*. Im *mikrokanonischen Ensemble* hingegen sind sowohl die Energie als auch die Teilchenzahl festgelegt. Der das System beschreibende Zustand im kanonischen Gibbs-Ensemble maximiert die Entropie unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Erwartungswertes der Energie im System. Der Lagrange-Multiplikator zur Lösung des Variationsproblems definiert die Temperatur des Systems. Ein einfaches Beispiel für ein klassisches System, welches thermalisiert, stellen in einer Box eingeschlossene Teilchen dar, die vollkommen elastische Stöße untereinander und mit den Wänden der Box ausführen. Die Bildung von Ensemble- und Zeitmittel dieses Systems ist in Abbildung 1.5 veranschaulicht.

(a) Ensemblemittel



(b) Zeitmittel

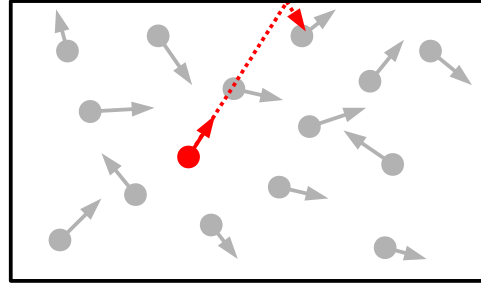


Abbildung 1.5: Illustration der Bildung (a) des Ensemblemittels und (b) des Zeitmittels der Impulsverteilung in einer Box eingeschlossener, untereinander und mit den Wänden der Box vollkommen elastisch stoßender Teilchen. Bei der Bildung des Ensemblemittels wird für die dargestellte Konfiguration des Systems die Verteilung über die Impulse aller Teilchen des Systems gebildet. Das Zeitmittel wird über den Impuls eines einzelnen Teilchens (rot hervorgehoben) über ein Zeitintervall gebildet. Während dieses Zeitintervalls ändert sich der Impuls des Teilchens durch Stöße mit anderen Teilchen sowie mit den Wänden der Box.

Unabhängig von der Anfangskonfiguration des Systems, d. h. den Anfangskordinaten und -impulsen der Teilchen, wird im Laufe der Zeit durch die Stöße der Teilchen untereinander und mit den Wänden der Box ein Energieaustausch zwischen den Teilchen stattfinden. Im Grenzfall großer Zeiten wird die Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen der Maxwell-Boltzmann-Statistik gehorchen, welche äquivalent zu dem kanonischen Gibbs-Ensemble ist. Die Temperatur des Systems wird dabei durch die in ihm vorhandene Energie bestimmt.

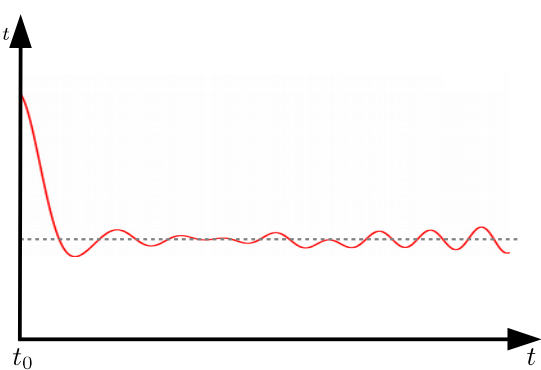
Während für klassische Systeme die Bedingungen, unter denen Thermalisierung beobachtet werden kann, bekannt sind, ist die Situation für quantenmechanische Systeme weit weniger klar und es bestehen noch viele offene Fragen. Im Gegensatz zu einem klassischen System vergisst ein quantenmechanisches System unter unitärer Zeitentwicklung niemals seinen Anfangszustand, da die Zeitentwicklung invariant unter Zeitumkehr ist und somit unter Kenntnis des die Zeitentwicklung bestimmenden Hamiltonoperators ausgehend von seinem Zustand zu einem beliebigen Zeitpunkt sein Anfangszustand immer rekonstruiert werden kann. So bleibt ein reiner Zustand unter unitärer Zeitentwicklung immer ein reiner Zustand, wohingegen ein thermisches System durch einen gemischten Zustand beschrieben wird. Weiterhin werden die Wahrscheinlichkeiten $|c_{\lambda,0}|^2$ im Dichteoperator des Diagonalesembles, welches, wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde, ein quantenmechanisches System mit nicht entarteten Energieeigenwerten in seinem stationären Zustand beschreibt, durch den Anfangszustand des Systems bestimmt. Gleiches gilt für die Koeffizienten im Dichteoperator im Falle der Entartung von Energieeigenwerten. Um nun zu klären, ob ein quantenmechanisches System nach einem Quench thermalisiert, gilt es, zu überprüfen, ob sein stationärer Zustand durch das kanonische Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann, d. h. ob die Erwartungswerte sowie die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Observablen im stationären Zustand des Systems mit den entsprechenden Größen gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble übereinstimmen. In Abbildung 1.6 ist schematisch der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes einer Observable \hat{O} nach dem Quench sowie ihr Erwartungswert für das System im thermischen Gleichgewicht gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble bei der durch die Exzessenergie des Systems nach dem Quench definierten Temperatur dargestellt, wobei in der Abbildung Zeit- und Ensemblemittel übereinstimmen.

Ein System mit Hamiltonoperator \hat{H} bei der Temperatur T wird im kanonischen Gibbs-Ensemble durch den Dichteoperator

$$\hat{\rho}_{\text{CGE}} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z_{\text{CGE}}} \quad \text{mit} \quad Z_{\text{CGE}} = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta\hat{H}} \right\} \quad (1.15)$$

beschrieben. Hierbei ist $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur und Z_{CGE} die kanonische Zustandssumme. Um nun zu entscheiden, ob ein System nach einem Quench thermalisiert, wird sein zeitgemittelter Dichteoperator im stationären Zustand mit dem Dichteoperator des kanonischen Gibbs-Ensembles verglichen.

Abbildung 1.6: Schematische Darstellung des zeitlichen Verlaufs des Erwartungswertes einer Observable \hat{O} nach dem Quench (—). Der Erwartungswert der Observable für das System im thermischen Gleichgewicht gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble bei der durch die Exzessenergie des Systems nach dem Quench bestimmten Temperatur ist als gestrichelte graue Linie eingezeichnet. In der Abbildung stimmen Zeitmittelwert und thermischer Erwartungswert überein, d. h. es tritt Thermalisierung auf.



Stimmen diese überein, so thermalisiert das System. Ein Vergleich des Dichteoperators im stationären Zustand ergibt somit für ein System mit nicht entarteten Energieeigenwerten die folgende Bedingung für Thermalisierung:

$$|c_{\lambda,0}|^2 = \frac{e^{-\beta E_\lambda}}{Z_{CGE}} \quad \forall \lambda. \quad (1.16)$$

Die Temperatur T ist dabei über den Erwartungswert der Energie im System bestimmt. Insbesondere für nicht exakt lösbare Systeme sind diese Untersuchungen aufgrund der Notwendigkeit der Diagonalisierung des Hamiltonoperators mit enormem rechnerischen Aufwand verbunden oder überhaupt nicht durchführbar, da sowohl die Eigenzustände als auch die Eigenenergien des Hamiltonoperators des Systems bekannt sein müssen. Aus diesem Grund wird bei den Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im Rahmen der vorliegenden Dissertation zum einen in Analogie zu der Darstellung in Abbildung 1.6 der zeitliche Mittelwert der Erwartungswerte verschiedener Observablen zu den entsprechenden Erwartungswerten des Systems gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble verglichen. Dabei ist zu beachten, dass sich für endliche Systemgrößen immer Schwankungen des zeitlichen Erwartungswertes der Observablen um ihren Zeitmittelwert ergeben. Weiterhin werden auch die zeitlichen Mittelwerte der Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu den Wahrscheinlichkeitsverteilungen im System im thermischen Gleichgewicht dem kanonischen Gibbs-Ensemble entsprechend verglichen.

Einfluss von Erhaltungsgrößen auf das Auftreten von Thermalisierung

Entscheidend dafür, ob ein quantenmechanisches Vielteilchensystem thermalisieren kann oder nicht, sind die in ihm vorhandenen Erhaltungsgrößen. Hierbei ist zwischen *integrablen* und *nichtintegrablen* Systemen zu unterscheiden. Während für klassische Systeme der Begriff der Integrabilität eindeutig definiert und mit der Existenz von Konstanten der Bewegung verknüpft ist, ist die Definition von Integrabilität in Bezug auf quantenmechanische Systeme nicht einheitlich. Eine Diskussion verschiedener gebräuchlicher Definitionen kann beispielsweise in [152] gefunden werden. Im Rahmen der vorliegenden Dissertation wird ein quantenmechanisches System als nichtintegabel bezeichnet, wenn nur seine Gesamtenergie unter unitärer Zeitentwicklung erhalten ist. Demgegenüber besitzt ein integrables System weitere Erhaltungsgrößen, aufgrund derer a priori klar ist, dass es nicht thermalisieren kann, da es unter unitärer Zeitentwicklung die Erinnerung an die Erwartungswerte aller Erhaltungsgrößen im Anfangszustand für alle Zeiten nicht verliert. Dies zeigt eindrucksvoll ein Experiment von Kinoshita *et al.* aus dem Jahre 2006 [153]. Im Rahmen dieses Experimentes wurde ein eindimensionales Bose-Gas aus ^{87}Rb -Atomen untersucht. Im Versuchsaufbau waren jeweils 40 bis 250 der Atome in einer anharmonischen eindimensionalen Falle eingeschlossen. Die Atome befanden sich zunächst als Bose-Einstein-Kondensat in der Mitte der Falle im Potentialminimum und wurden dort festgehalten. Anschließend wurden sie in einen Überlagerungszustand mit entgegengesetzten Impulsen $\pm 2k$ versetzt und das sie in der Mitte der Falle haltende Potential abgeschaltet, woraufhin sich zwei Atomwolken mit entgegengesetzten Impulsen bildeten, die in der Falle eine gegenphasige Schwingung mit Periodendauer τ ausführten. Dies ist in Abbildung 1.7(a) schematisch dargestellt. Abbildung 1.7(b) zeigt eine Falschfarbenaufnahme der Absorptionsspektren der beiden Atomwolken für die ersten Schwingungen ihrer Bewegung. Hierbei konnte selbst nach vielen tausend Kollisionen der beiden Atomwolken keine merkliche Equilibrierung beobachtet werden. Ursache hierfür sind die im System

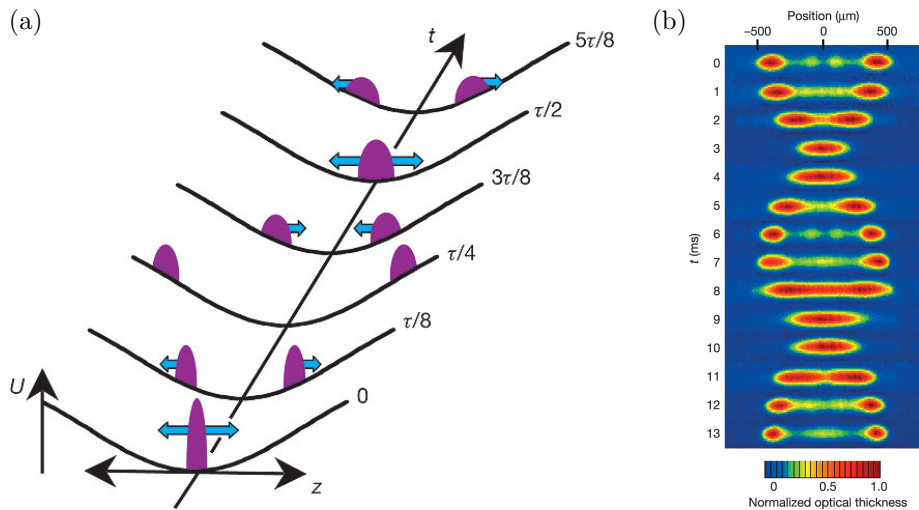


Abbildung 1.7: (a) Schematische Darstellung der Bewegung zweier aus dem Gleichgewicht gebrachter Atomwolken in einer eindimensionalen anharmonischen Falle. Zum Zeitpunkt $t = 0$ werden die Atome in einen Überlagerungszustand mit Impulsen $\pm 2k$ versetzt und führen im Anschluss daran gegenphasige Schwingungen mit Periodendauer τ aus. Während jeder Periode kollidieren die Atome zweimal in der Mitte der Falle zu den Zeiten $t = \tau/2$ und $t = \tau$. Aufgrund von Anharmonizitäten dehnen sich die beiden Atomwolken mit der Zeit aus, bis sie schließlich vollständig dephasiert sind. (b) Falschfarbenaufnahme der Absorptionsspektren der beiden Atomwolken in der eindimensionalen anharmonischen Falle. Das System erreicht selbst nach mehreren tausend Stößen nicht merklich ein thermisches Gleichgewicht. Die Abbildungen wurden aus [153] entnommen. *Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: Nature 440, 900-903, copyright 2006.*

vorhandenen Erhaltungsgrößen, die verhindern, dass das System ein thermisches Gleichgewicht erreicht. Bei dem in [153] durch Kinoshita *et al.* untersuchten Bose-Gas handelt es sich um ein integrables System. Jedoch ist auch für nichtintegrable Systeme das Auftreten von Thermalisierung unter Zeitentwicklung nicht zwingend. Hierzu existieren zahlreiche Studien, von denen einige im Folgenden erläutert werden sollen.

Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH)

Ein verbreitetes Verfahren, um Aussagen darüber zu treffen, ob ein quantenmechanisches Vielteilchensystem thermalisiert, ist die *Eigenstate Thermalization Hypothesis* (ETH). Der Begriff Eigenstate Thermalization wurde erstmals 1994 von Srednicki verwendet [154]. Srednicki hat gezeigt, dass beschränkte quantenmechanische Vielteilchensysteme unter unitärer Zeitentwicklung gegen ein thermisches Gleichgewicht streben, wenn das entsprechende klassische System chaotisches Verhalten aufweist und die Energieeigenzustände, die in der Entwicklung des Zustandes des quantenmechanischen Systems in der Eigenbasis des Hamiltonoperators auftreten, sich wie gaußverteilte Zufallsvariablen verhalten. Als Beispielsystem wurde ein Gas aus harten Teilchen betrachtet. Eine ähnliche Idee wurde bereits drei Jahre zuvor im Jahre 1991 durch Deutsch formuliert [155], der jedoch noch nicht den Begriff Eigenstate Thermalization verwendete. Deutsch zeigte, dass die Zeitmittelwerte eines geschlossenen quantenmechanischen Systems mit einer großen Anzahl an Freiheitsgraden nicht notwendigerweise mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung gemäß dem mikrokanonischen Ensemble übereinstimmen müssen. Diese Abweichungen wurden dann beobachtet, wenn die verschiedenen Freiheitsgrade des Systems nicht miteinander gekoppelt sind, und konnten durch Einführung einer kleinen Störung in Form einer Zufallsmatrix beseitigt werden. Zudem wurden Erwartungswerte in den Energieeigenzuständen des gestörten Systems untersucht und gezeigt, dass Abweichungen zum mikrokanonischen System mit der Anzahl an Freiheitsgraden exponentiell abfallen. Der zentrale Aspekt dieser beiden Arbeiten [154, 155], die den Grundstein der Eigenstate Thermalization Hypothesis gelegt haben, ist die Untersuchung von Erwartungswerten in den Energieeigenzuständen des betrachteten Systems. Bevor Anwendungen der ETH auf verschiedene quantenmechanische Modellsysteme

me beschrieben werden, sollen im Folgenden die Idee und die zentralen Aussagen der ETH kurz erläutert werden. Diese Erläuterung orientiert sich an der durch Rigol und Srednicki in [156] gegebenen Zusammenfassung der ETH.

Statt wie in klassischen Systemen Ergodizität durch chaotisches Verhalten des Systems zu erklären, besteht die Idee der ETH darin, Matrixelemente von Observablen in Energieeigenzuständen zu untersuchen. Seien zu diesem Zweck \hat{O} der Operator einer lokalen Observable und E_λ die Eigenwerte des Hamiltonoperators \hat{H} eines quantenmechanischen Vielteilchensystems der Größe N zu den Eigenzuständen $|\Psi_\lambda\rangle$. Eine Observable wird als lokal bezeichnet, wenn der sie beschreibende Operator nur auf eine endliche Zahl an Positionen des Systems wirkt, die auch im thermodynamischen Limes nur einen endlichen Abstand voneinander haben. Durch die Messung lokaler Observablen können Mikrozustände nicht unterschieden werden. Die ETH sagt voraus, dass sich der Erwartungswert einer Observable für ein System, welches in einem beliebigen Anfangszustand präpariert wurde, unter unitärer Zeitentwicklung zu dem durch das mikrokanonische Ensemble vorhergesagten Wert entwickelt und nur kleine Fluktuationen um diesen herum aufweisen wird, wenn die folgenden zwei Bedingungen erfüllt sind:

- (i) Die Erwartungswerte $\mathcal{O}_{\lambda\lambda} := \langle \Psi_\lambda | \hat{O} | \Psi_\lambda \rangle$ von \hat{O} ändern sich langsam als Funktion des Zustandes, wobei die Differenz $\mathcal{O}_{\lambda+1\lambda+1} - \mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ zwischen den Erwartungswerten von \hat{O} in energetisch benachbarten Eigenzuständen von \hat{H} mit der Systemgröße N exponentiell klein wird.
- (ii) Die Nichtdiagonalelemente $\mathcal{O}_{\lambda\lambda'} := \langle \Psi_\lambda | \hat{O} | \Psi_{\lambda'} \rangle$ mit $\lambda \neq \lambda'$ sind exponentiell klein in N .

Die ETH wurde für eine Vielzahl quantenmechanischer Vielteilchensysteme, die im Hinblick auf die Parameter des Hamiltonoperators hinreichend weit von Punkten der Integrabilität entfernt sind, numerisch bestätigt [108, 109, 113, 157–159]. Für integrable Modelle oder Modelle nahe eines integrablen Punktes im Parameterraum hingegen gilt die ETH nicht [97, 108, 109, 113, 157–159].

Zur Erläuterung der Bedeutung der ETH werde die Zeitentwicklung des Erwartungswertes des Operators \hat{O} ausgehend vom Anfangszustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ zum Zeitpunkt t_0 gemäß (1.9) betrachtet. Im Falle nicht entarteter Eigenwerte des Hamiltonoperators ist der zeitliche Mittelwert im Limes $t \rightarrow \infty$ gemäß (1.10) durch die Diagonalterme $\mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ gegeben. Dabei ist $\mathcal{O}(E)$ mit $\mathcal{O}(E_\lambda) := \mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ eine glatte Funktion der Energie [160]. In einem chaotischen System ist die Annahme der Nichtentartung der E_λ gerechtfertigt. Der Erwartungswert der Energie des Systems ist zeitunabhängig und gegeben durch

$$E = \sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 E_{\lambda} \tag{1.17}$$

mit der Standardabweichung

$$\Delta E = \sqrt{\sum_{\lambda} |c_{\lambda,0}|^2 (E_{\lambda} - E)^2} . \tag{1.18}$$

Hierbei wird angenommen, dass ΔE algebraisch klein in N ist. Die Summe auf der rechten Seite von (1.10) läuft somit effektiv über einen Energiebereich der Breite ΔE mit Mittelpunkt E . Gemäß der ETH ist $\mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ über diesen Energiebereich in guter Näherung konstant, sodass die rechte Seite von (1.10) abgesehen von algebraisch kleinen Korrekturen mit dem Mittelwert von \hat{O} gemäß dem mikrokanonischen Ensemble über das gleiche Energiefenster übereinstimmt unabhängig von den genauen Werten der Entwicklungskoeffizienten $|c_{0,\lambda}|^2$ des Anfangszustandes in der Energieeigenbasis. Die Temperatur T ist hierbei implizit über die Energie E bestimmt gemäß

$$E = \frac{\text{Sp} \left\{ \hat{H} e^{-\hat{H}/T} \right\}}{\text{Sp} \left\{ e^{-\hat{H}/T} \right\}} . \tag{1.19}$$

Abschließend sei erwähnt, dass die ETH eine hinreichende, aber keine notwendige Bedingung für das Auftreten von Thermalisierung darstellt [161], d. h. sagt die ETH Thermalisierung voraus, so thermalisiert das System, sagt die ETH hingegen keine Thermalisierung voraus, so ist dennoch Thermalisierung möglich, muss jedoch durch andere Verfahren nachgewiesen werden. Ein Überblick über die ETH und ihre Anwendungen kann in [162] gefunden werden.

Die ETH wurde unter anderem auf Systeme von Hard-Core-Bosonen [97, 108, 109, 111, 113, 157, 158, 163, 164]

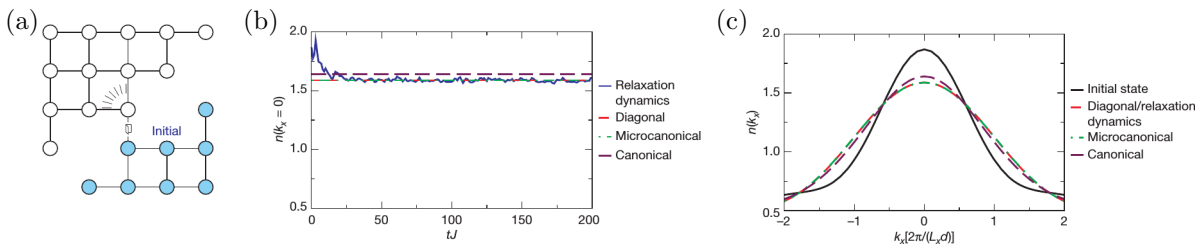


Abbildung 1.8: (a) Anfangskonfiguration des von Rigol *et al.* in [108] untersuchten Systems von Hard-Core-Bosonen. Das System ist in zwei Subsysteme unterteilt, von denen eines vollständig mit Hard-Core-Bosonen gefüllt ist und das andere keine Hard-Core-Bosonen enthält. Um das System aus dem Gleichgewicht zu bringen, wird eine einzelne Kopplung zwischen den beiden Subsystemen eingeschaltet. (b) Zeitentwicklung des Anteils an Hard-Core-Bosonen mit verschwindender Impulskomponente in x -Richtung. Der Wert von $n(k_x = 0)$ konvergiert für große Zeiten gegen den Wert gemäß dem Diagonaleensemble, welcher wiederum mit dem Wert gemäß dem mikrokanonischen Ensemble übereinstimmt. Zu dem Wert gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble zeigen sich Abweichungen. (c) Volle Impulsverteilung für den Anfangszustand, das relaxierte System bzw. das Diagonaleensemble, das mikrokanonische sowie das kanonische Ensemble. Die Abbildungen wurden aus [108] entnommen. *Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: Nature* **452**, 854-858, copyright 2008.

bzw. Fermionen [109, 113, 157, 159], das Bose-Hubbard-Modell [101, 165], das Lieb-Liniger-Modell [166], das Heisenberg-Modell [76, 167–170] und das transversale Ising-Modell in einer [163] sowie in zwei Dimensionen [160, 171] angewendet. Auf einige dieser Untersuchungen soll im Folgenden näher eingegangen werden, um einen Überblick über den Stand der Forschung zum Auftreten von Thermalisierung in nichtintegrierbaren quantenmechanischen Vielteilchensystemen und die Bedeutung der ETH in diesem Kontext zu geben. Den Anfang bilden die Studien von Rigol *et al.* in [108], die sich mit Hard-Core-Bosonen auf einem zweidimensionalen Gitter beschäftigt haben, welches zu Beginn in zwei voneinander getrennte Subsysteme unterteilt ist. Das eine Subsystem ist vollständig mit Hard-Core-Bosonen gefüllt, d. h. auf jedem Gitterplatz befindet sich ein Hard-Core-Boson, wohingegen das andere Subsystem keine Hard-Core-Bosonen enthält. Die Ausgangskonfiguration ist in Abbildung 1.8 (a) dargestellt. Um das System aus dem Gleichgewicht zu bringen, wurde eine einzelne Kopplung zwischen den Subsystemen eingeschaltet. Im Anschluss daran wurde als Observable die Impulsverteilung der Hard-Core-Bosonen in x -Richtung bestimmt. Hierbei zeigte sich, dass sich das System für große Zeiten hin zu einem durch das Diagonaleensemble bestimmten Zustand entwickelt. Die Impulsverteilung in diesem stimmt mit derjenigen im mikrokanonischen Ensemble überein und zeigt Abweichungen vom kanonischen Gibbs-Ensemble. Eine Erklärung dieser Beobachtung wurde durch die ETH gegeben, indem gezeigt wurde, dass die Impulsverteilungen $n(k_x)$ in zwei typischen Energieeigenzuständen, deren Energien nahe dem Wert der Energie innerhalb des Systems liegen, mit dem Resultat im mikrokanonischen Ensemble übereinstimmt.

In [109] sowie [113] hat Rigol Hard-Core-Bosonen bzw. stark gekoppelte Fermionen auf einem eindimensionalen Gitter der endlichen Länge L untersucht. Die betrachteten Systeme wurden durch die Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \left\{ -t \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i \right) + V \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2} \right) - t' \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+2} + \hat{a}_{i+2}^\dagger \hat{a}_i \right) + V' \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+2} - \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (1.20)$$

bzw.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \left\{ -t \left(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i \right) + V \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2} \right) - t' \left(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+2} + \hat{c}_{i+2}^\dagger \hat{c}_i \right) + V' \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+2} - \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (1.21)$$

beschrieben. Bei den \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i bzw. den \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i handelt es sich um die Erzeuger und Vernichter der Hard-Core-Bosonen bzw. Fermionen. Die \hat{n}_i sind die entsprechenden Teilchenzahloperatoren, gegeben durch $\hat{n}_i := \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ bzw. $\hat{n}_i := \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$. t und t' sind die Tunnelkonstanten zwischen nächstbenachbarten bzw. übernächstbenachbarten Gitterplätzen, V und V' die Wechselwirkungskonstanten zwischen Teilchen auf nächstbenachbarten bzw. übernächstbenachbarten Gitterplätzen. Das System wurde durch einen Quench

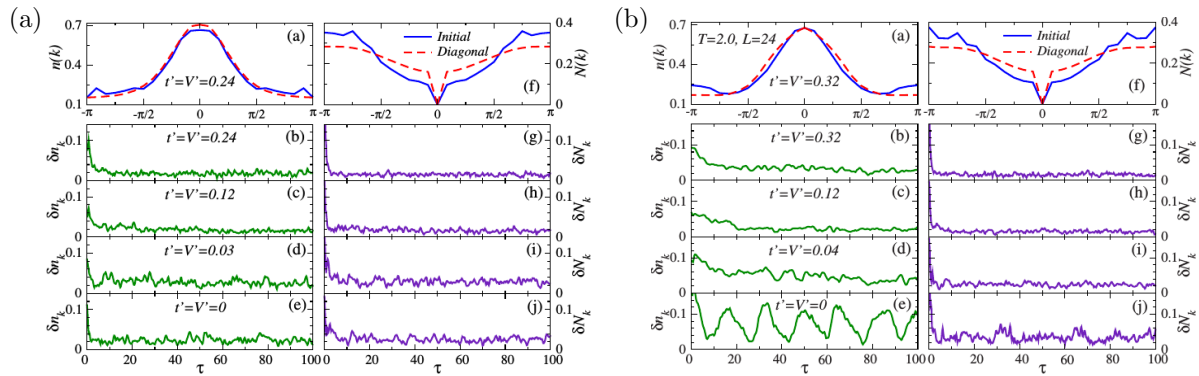


Abbildung 1.9: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulse und Dichte-Dichte-Strukturfaktor sowie zeitlicher Verlauf der Abweichungen von den Werten gemäß dem Diagonalensemble für ein System aus 8 (a) Hard-Core-Bosonen bzw. (b) Fermionen beschrieben durch die Hamiltonoperatoren (1.20) bzw. (1.21) auf einem linearen Gitter der Länge $L = 24$ nach dem Quench $t_i = 0.5, V_i = 2.0 \rightarrow t_f = 1.0, V_f = 1.0$ mit $t'_i = t'_f = t'$ und $V'_i = V'_f = V'$. Abbildung (a) wurde aus [109] entnommen, Abbildung (b) aus [113]. (a) *Reprinted with permission from Rigol, Physical Review Letters* **103**, 100403, 2009. Copyright 2009 by the American Physical Society. (b) *Reprinted with permission from Rigol, Physical Review A* **80**, 053607, 2009. Copyright 2009 by the American Physical Society.

der Werte von t und V aus dem Gleichgewicht gebracht. t' und V' hingegen blieben unverändert. Als Observablen wurden die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulse

$$\hat{n}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{-k(i-j)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad \text{bzw.} \quad \hat{n}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{-k(i-j)} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \quad (1.22)$$

sowie der Dichte-Dichte-Strukturfaktor

$$\hat{N}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j} e^{-k(i-j)} \hat{n}_i \hat{n}_j. \quad (1.23)$$

untersucht. Durch die Betrachtung verschiedener Quenchprotokolle, die das System zu Punkten des Parameterraumes mit unterschiedlichem Abstand vom Punkt der Integrabilität ($t' = V' = 0$) brachten, konnte gezeigt werden, dass die Systeme weit entfernt vom integrablen Punkt thermalisieren und dass Abweichungen von Thermalisierung auftreten, wenn der Endpunkt des Quenchs sich dem Punkt der Integrabilität nähert. In Abbildung 1.9 sind die Erwartungswerte von $\hat{n}(k)$ und $\hat{N}(k)$ sowie die zeitliche Entwicklung der Abweichungen

$$\delta n_k(\tau) = \frac{\sum_k |n(k, \tau) - n_{\text{diag}}(k)|}{\sum_k n_{\text{diag}}(k)} \quad \text{bzw.} \quad \delta N_k(\tau) = \frac{\sum_k |N(k, \tau) - N_{\text{diag}}(k)|}{\sum_k N_{\text{diag}}(k)} \quad (1.24)$$

von den Werten gemäß dem Diagonalensemble für das System aus Hard-Core-Bosonen sowie das fermionische System graphisch dargestellt. Dabei weist der Dichte-Dichte-Strukturfaktor für das System der Hard-Core-Bosonen und das fermionische System ein sehr ähnliches Verhalten auf, während sich bei Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Impulse Unterschiede ergeben. Die zunehmenden Abweichungen von thermischem Verhalten bei Annäherung an den integrablen Punkt wurden durch Rigol wiederum mithilfe der ETH erklärt.

Bose-Hubbard-Modell (BHM)

Bei dem Bose-Hubbard-Modell handelt es sich um eines der bedeutendsten quantenmechanischen Vielteilchensysteme. Es beschreibt Bosonen auf einem Gitter, die zwischen benachbarten Gitterplätzen tunneln können und eine gegenseitige Abstoßung voneinander erfahren, wenn sie sich auf demselben Gitterplatz befinden. Das Bose-Hubbard-Modell ist sowohl in einer Dimension als auch in zwei Dimensionen nichtin-

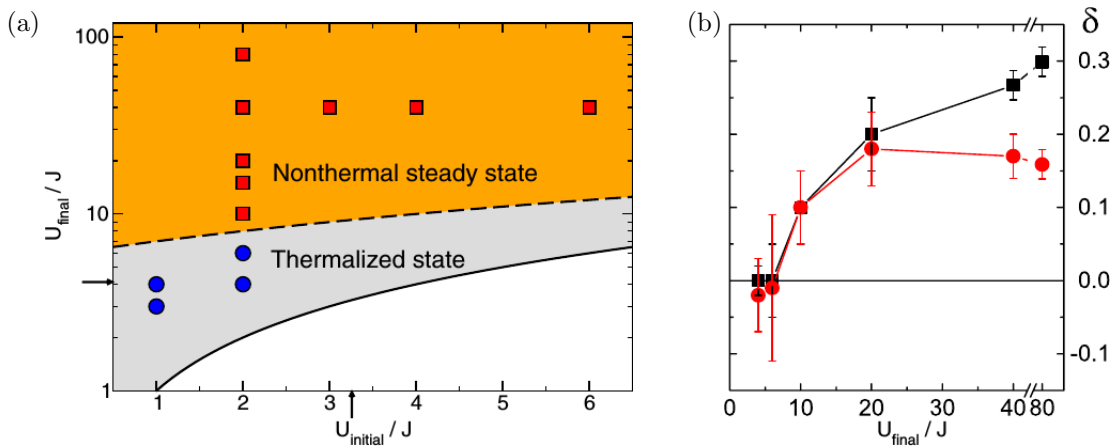


Abbildung 1.10: (a) Nichtgleichgewichtsphasendiagramm des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells. Es existieren zwei Regionen innerhalb des Phasendiagramms. In der einen Region ist der stationäre Zustand des Systems eindeutig nicht thermisch, während in der anderen Region das System im Rahmen des numerischen Fehlers thermalisiert. (b) Abweichung zwischen den Korrelationsfunktionen $\langle \hat{b}_r^\dagger(t) \hat{b}_0(t) \rangle$ im stationären Zustand des Systems nach dem Quench und im Grundzustand des Hamiltonoperators nach dem Quench für $r = 1$ (■) und $r = 2$ (●) entlang der Linie $U_i/J = 2$. Der Übergang von einem Abfall langsamer als im Grundzustand ($\delta < 0$) zu einem schnelleren Abfall ($\delta > 0$) erfolgt bei $U_i/J \approx 6$. Die Abbildungen wurden aus [91] entnommen. *Reprinted with permission from Kollath et al., Physical Review Letters* **98**, 180601, 2007. Copyright 2007 by the American Physical Society.

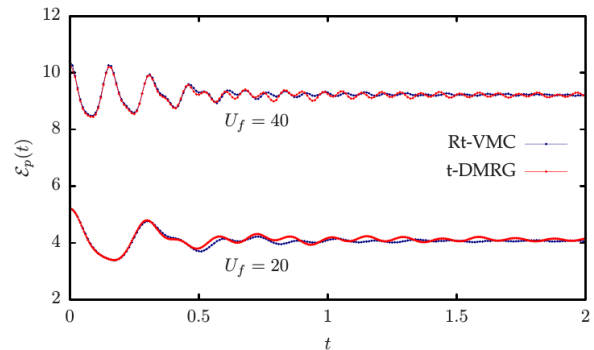
tegrabel und wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(\hat{b}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}'} + \hat{b}_{\mathbf{r}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}} \right) + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) \quad (1.25)$$

beschrieben. Dabei ist J die Tunnelkonstante für die Übergänge von Bosonen zwischen benachbarten Gitterplätzen und U die Abstoßung zwischen Bosonen auf demselben Gitterplatz, die sogenannte On-Site Repulsion. Die $\hat{b}_{\mathbf{r}}^\dagger$ und $\hat{b}_{\mathbf{r}}$ sind bosonische Erzeuger bzw. Vernichter, $\hat{n}_{\mathbf{r}} := \hat{b}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}}$ ist der zugehörige bosonische Besetzungszahloperator. Für ganzzahlige Besetzung zeigt das Bose-Hubbard-Modell einen Phasenübergang zwischen Suprafluid für $U/J < (U/J)_{\text{crit}}$ und Mott-Isolator für $U/J > (U/J)_{\text{crit}}$. Bei Füllung mit einem Teilchen pro Gitterplatz ist für das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell $(U/J)_{\text{crit}} \approx 3.37$ [172] und für das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell $(U/J)_{\text{crit}} \approx 16.7$ [173].

Die erste hier betrachtete Studie zum Auftreten von Thermalisierung im Bose-Hubbard-Modell geht zurück auf Kollath *et al.* in [91] aus dem Jahre 2007. Untersucht wurden die Nichtdiagonalelemente $\langle \hat{b}_{\mathbf{r}}^\dagger(t) \hat{b}_0(t) \rangle$ der Korrelationen zwischen verschiedenen Positionen des Gitters nach Quenches der On-Site Repulsion für verschiedene Start- und Endwerte U_i bzw. U_f sowohl im ein- als auch im zweidimensionalen Bose-Hubbard-Modell. Die Berechnung der Zeitentwicklung erfolgte für das ein- und das zweidimensionale System mithilfe exakter Diagonalisierung für Systemgrößen bis hin zu 18 Gitterplätzen. Für das Modell in einer Dimension wurde darüber hinaus mittels Anwendung einer zeitabhängigen Dichtematrixrenormierungsgruppe (t-DMRG) ein System mit 64 Gitterplätzen untersucht. Dabei wurde für kleine Verhältnisse U_f/J Thermalisierung beobachtet, wohingegen sich für große Verhältnisse U_f/J zwar eine Equilibrierung einstellte, sich der stationäre Zustand der Nebendiagonalelemente der Korrelationen jedoch als nicht thermisch erwies. Die Grenze der Verhältnisse U_f/J , oberhalb derer der stationäre Zustand nicht thermisch ist, steigt mit U_i/J geringfügig an. Dies ist in Abbildung 1.10 (a) dargestellt. Für festes Verhältnis $U_i/J = 2$ vor dem Quench wurde zudem für verschiedene Verhältnisse U_f/J nach dem Quench der Abfall der Korrelationen im stationären Zustand des Systems untersucht. Dabei zeigte sich ein Übergang von einem Abfall langsamer als im Grundzustand des Hamiltonoperators mit U_f/J in dem Bereich, in dem Thermalisierung beobachtet wurde, zu einem schnelleren Abfall in dem Bereich, in dem der stationäre Zustand nicht thermisch ist. Für Quenchprotokolle beginnend bei $U_i/J = 2$ liegt dieser Übergang bei $U_f/J \approx 6$. Eine Darstellung hiervon findet sich in Abbildung 1.10 (b). Eine mögliche Er-

Abbildung 1.11: Vergleich der Resultate für die Zeitentwicklung von $\varepsilon_p(t)$ im eindimensionalen Bose-Hubbard-Modell bestimmt mithilfe von rt-VMC (—) und t-DMRG (—) nach Quenchs mit $U_i/J = 2$ und $U_i/J = 20$ bzw. $U_i/J = 40$. Die rt-VMC-Resultate wurden für die Kette mit 100 Gitterplätzen und periodischen Randbedingungen bestimmt, die t-DMRG-Resultate in der Mitte der Kette mit 64 Gitterplätzen und freien Randbedingungen. Es zeigt sich in beiden Fällen eine sehr gute Übereinstimmung. Die Abbildung wurde aus dem Begleitmaterial von [44] entnommen.



klärung für dieses Verhalten wurde mithilfe einer semiklassischen Theorie der Wechselwirkung zwischen Quasiteilchen im System (Doublonen und Holonen) gegeben.

Um eine von den konkreten Observablen unabhängige Aussage zum Auftreten von Thermalisierung im Bose-Hubbard-Modell treffen zu können, hat Roux 2009 in [94] mithilfe des Lanczos-Verfahrens die zeitgemittelte Dichtematrix des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells nach Quenchs der On-Site Repulsion für Systeme mit bis zu 14 Gitterplätzen untersucht. Auf diese Weise konnten auch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $|c_{0,\lambda}|^2$ der Eigenzustände des Hamiltonoperators nach dem Quench im stationären Zustand bestimmt und mit denjenigen im thermischen System verglichen werden. Dabei ergab sich in Analogie zu den Resultaten von Kollath *et al.* eine Boltzmann-Verteilung gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble für kleine Verhältnisse U_f/J und eine Verteilung, die keinem Ensemble der statistischen Physik entspricht, im Falle stärkerer Quenchs. Hierbei zeigte sich in der zeitgemittelten Dichtematrix auch eine Erinnerung des Systems an seinen Anfangszustand.

Im Folgejahr haben Biroli *et al.* in [165] die Bedeutung von Eigenzuständen, die gemäß dem mikrokanonischen Ensemble nur mit geringer Wahrscheinlichkeit auftreten, für das Nichtauftreten von Thermalisierung untersucht. Dabei wurde auch explizit auf das Bose-Hubbard-Modell eingegangen. Ausgehend von ihren Überlegungen haben Biroli *et al.* gefolgert, dass zwei Effekte zum Nichtauftreten von Thermalisierung im Bose-Hubbard-Modell beitragen. Der erste Effekt ist die endliche Systemgröße, die dazu führt, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $|c_{0,\lambda}|^2$ der Eigenwerte E_λ des Hamiltonoperators sehr breit sind und dass in einem vorgegebenen Energieintervall große Unterschiede zwischen den Erwartungswerten $\mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ einer Observable beschrieben durch den Operator \hat{O} bestehen können. Diese Ursache für Nichtthermalisierung des Systems verschwindet für hinreichend große Systemgrößen. Biroli *et al.* haben jedoch gezeigt, dass auch Energieeigenzustände existieren können, für die $\mathcal{O}_{\lambda\lambda}$ vom mikrokanonischen Erwartungswert abweicht. Kommt einem derartigen Zustand ein großes Gewicht $|c_{0,\lambda}|^2$ zu, so kann sein Beitrag Abweichungen von thermischem Verhalten des Systems hervorrufen. Dieser Effekt verschwindet nicht notwendigerweise im thermodynamischen Limes.

Die letzte Studie des Bose-Hubbard-Modells, auf die im Rahmen dieses Überblicks eingegangen werden soll, stammt von Carleo *et al.* aus dem Jahre 2012 [98]. Die Untersuchungen ähneln denjenigen von Kollath *et al.* in [91]. Es wurden wiederum das ein- und das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell nach Quenchs der On-Site Repulsion betrachtet. Als Observable wurde der Erwartungswert $\varepsilon_p(t)$ des Beitrages der Abstoßung zwischen Bosonen auf demselben Gitterplatz als Funktion der Zeit bestimmt. Durch Verwendung eines Variations-Monte-Carlo-Verfahrens in Realzeit (rt-VMC) konnten die erreichbaren Systemgrößen für das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell auf eine Kette mit periodischen Randbedingungen und 200 Gitterplätzen und für das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell auf ein Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen und 20×20 Gitterplätzen erweitert werden. Als Ansatzfunktion für das Variations-Monte-Carlo-Verfahren wurde der Jastrowansatz verwendet [174]. Für das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell wurden die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens mit t-DMRG-Resultaten von Kollath verglichen. Wie in Abbildung 1.11 dargestellt zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung. In den anschließenden Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung nach den Quenchs wurden für das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell Quenchs von $U_i/J = 2$ zu $U_f/J = 2.5, 3, 4, 12, 20$ und 40 sowie für das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell Quenchs von $U_i/J = 4$ zu $U_f/J = 4.5, 5, 6, 20, 30$ und 40 untersucht und die Resultate mit den großkanonischen thermischen Erwartungswerten verglichen. Wie Abbildung 1.12 entnommen werden kann, zeigte sich hierbei für die

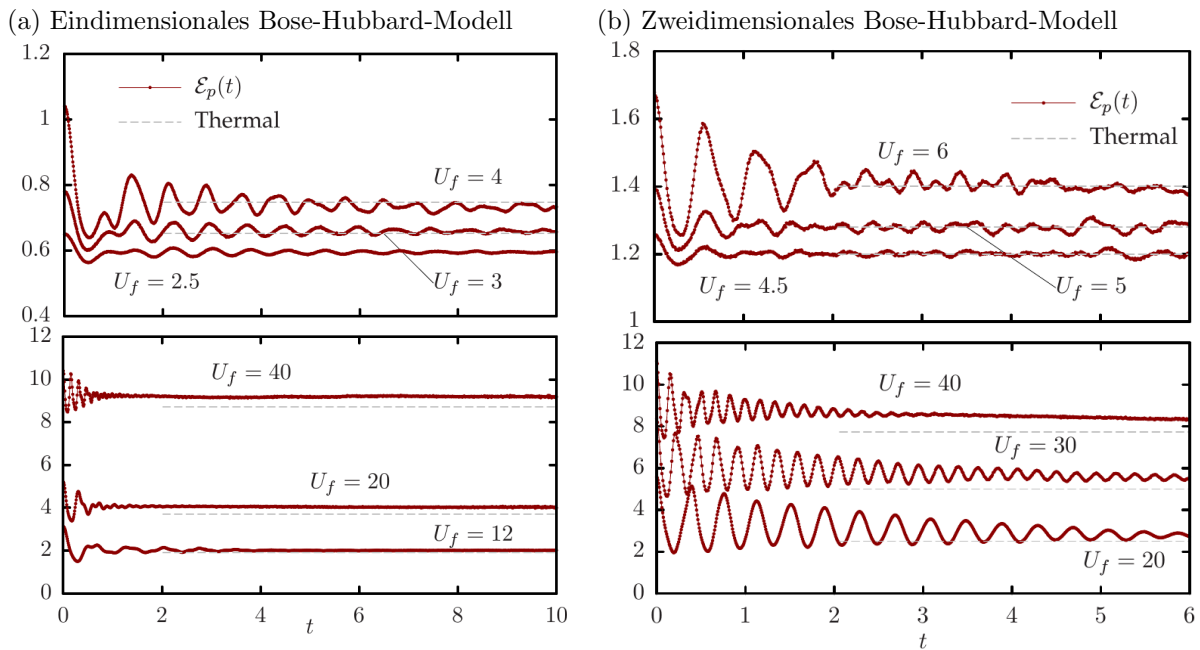


Abbildung 1.12: Zeitentwicklung des Erwartungswertes $\varepsilon_p(t)$ des Beitrages der Abstoßung zwischen Bosonen auf demselben Gitterplatz für (a) das eindimensionale Bose-Hubbard-Modell und (b) das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell. Das eindimensionale System wird auf der Kette mit 200 Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen und den Anfangswerten $U_i/J = 2$ betrachtet, das zweidimensionale System auf dem Quadratgitter der Größe 20×20 mit periodischen Randbedingungen und den Anfangswerten $U_i/J = 4$. Erwartungswerte gemäß dem großkanonischen Ensemble sind jeweils in grau eingezeichnet. Die oberen Graphen zeigen Quenchs für den Bereich von U_f/J , für den Thermalisierung beobachtet wird, die unteren Graphen Quenchs für den Bereich, in dem Abweichungen auftreten. Die Abbildungen wurden aus [44] entnommen.

drei schwachen Quenchprotokolle sowohl für das eindimensionale (Abbildung 1.12 (a)) als auch für das zweidimensionale System (Abbildung 1.12 (b)) eine gute Übereinstimmung, während für die stärkeren Quenchs in beiden Fällen Abweichungen von den thermischen Erwartungswerten beobachtet wurden. Diese Beobachtungen stehen in Übereinstimmung mit den Resultaten von Kollath *et al.* in [91]. Durch das Variations-Monte-Carlo-Verfahren konnten dabei größere Systeme untersucht werden. Dass für diese die gleichen Abweichungen von thermischem Verhalten gefunden wurden wie in [91], spricht dafür, dass die Abweichungen nicht durch die endliche Systemgröße hervorgerufen werden, sondern sie wie in [165] erläutert eine dem System innewohnende Ursache haben müssen.

Die beschriebenen theoretischen Vorhersagen für das Bose-Hubbard-Modell konnten 2016 durch Kaufman *et al.* in [142] experimentell im Rahmen des ihnen zugänglichen Parameterbereiches bestätigt werden. Untersucht wurde ein Bose-Einstein-Kondensat aus ^{87}Rb -Atomen in einem zweidimensionalen optischen Gitter, welches durch den Bose-Hubbard-Hamiltonoperator beschrieben werden kann. Dabei konnten die Tunnelkonstanten in x - und y -Richtung im Experiment individuell gesteuert werden, sodass der das System beschreibende Hamiltonoperator von der Gestalt

$$\hat{H} = - \left\{ J_x \sum_{x,y} \left(\hat{b}_{x,y}^\dagger \hat{b}_{x+1,y} + \hat{b}_{x+1,y}^\dagger \hat{b}_{x,y} \right) + J_y \sum_{x,y} \left(\hat{b}_{x,y}^\dagger \hat{b}_{x,y+1} + \hat{b}_{x,y+1}^\dagger \hat{b}_{x,y} \right) \right\} + \frac{U}{2} \sum_{x,y} \hat{n}_{x,y} (\hat{n}_{x,y} - 1) \quad (1.26)$$

war. Das Verhältnis U/J konnte über einen weiten Bereich von $U/J \ll 1$ bis $U/J \gg 1$ reguliert werden. Betrachtet wurde ein aus einem größeren Mott-Isolator mit einem Teilchen pro Gitterplatz isolierter Bereich von 2×6 -Gitterplätzen. Auf diese Weise wurden zwei identische Kopien einer Bose-Hubbard-Kette mit freien Randbedingungen und jeweils 6 Gitterplätzen erzeugt. Die Nichtgleichgewichtsrelaxation des Systems wurde dadurch initiiert, dass das Tunneln in x -Richtung instantan eingeschaltet und das Tunneln in y -Richtung unterdrückt wurde. Ein Heraustunneln von Atomen an den Enden der beiden Ketten

wurde durch Barrieren verhindert. Der Anfangszustand des Systems stellte somit einen hoch angeregten Zustand des Systems nach dem Quench mit nicht verschwindendem Überlapp mit einer großen Anzahl an Eigenzuständen des Hamiltonoperators dar. Experimentell bestimmt wurde unter anderem die zeitliche Entwicklung der Verschränkungsentropie zwischen einem Subsystem und dem restlichen System für Größen des Subsystems von einem bis hin zu drei Gitterplätzen. Für die Einzelheiten des Messprozesses sei auf [142] verwiesen. Die Werte der Verschränkungsentropie nach dem Quench haben hierbei eine gute Übereinstimmung zu den Werten im thermischen System gezeigt. Neben der Übereinstimmung für diese lokalen Größen wurde auch eine Übereinstimmung zwischen dem Erwartungswert des Wechselwirkungsanteils des Hamiltonoperators, welcher eine globale Observable darstellt, für das System nach dem Quench und das thermische System beobachtet. Der in [142] untersuchte Parameterbereich von U_f/J umfasste allerdings nur den Bereich, für den in den zuvor besprochenen theoretischen Studien von Kollath *et al.* in [91] sowie von Carleo *et al.* in [98] Thermalisierung vorhergesagt wurde. Ein experimenteller Nachweis der Abweichungen von thermischem Verhalten für größere Verhältnisse U_f/J steht somit noch aus.

Transversales Ising-Modell (TFIM)

Das transversale Ising-Modell ist neben dem Bose-Hubbard-Modell eines der bedeutendsten Standardmodelle für quantenmechanische Vielteilchensysteme. Es beschreibt auf einem Gitter angeordnete Spin-1/2, die sowohl untereinander als auch mit einem externen transversalen Feld wechselwirken. Der Hamiltonoperator des transversalen Ising-Modells hat die Form

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x - \frac{h}{2} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \quad (1.27)$$

mit der Kopplungskonstante J zwischen nächstbenachbarten Spins und der Stärke h des externen transversalen Feldes. Die Untersuchung des transversalen Ising-Modells stellt den Schwerpunkt der vorliegenden Dissertation dar. Es werden sowohl seine Zeitentwicklung nach verschiedenen Quenchprotokollen als auch sein stationärer Zustand in ein sowie in zwei Dimensionen untersucht. Da das transversale Ising-Modell in einer Dimension integrierbar ist, beschränken sich Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung auf das Modell in zwei Dimensionen. Hierbei ist festzuhalten, dass, obwohl es sich bei dem transversalen Ising-Modell um ein Standardmodell der Quantenmechanik handelt, für die Nichtgleichgewichtsdynamik und den stationären Zustand des zweidimensionalen Modells kaum Ergebnisse vorliegen. Die einzigen bisher durchgeführten Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell erfolgten auf Grundlage der ETH [160, 171]. Die Diskussion der genannten Resultate sei an dieser Stelle zurückgestellt. Sie erfolgt in einem späteren Kapitel der vorliegenden Dissertation zu Beginn der Betrachtungen zum zweidimensionalen transversalen Ising-Modell.

Thermalisierung in weiteren nichtintegrierbaren Systemen

Bevor sich dem transversalen Ising-Modell zugewandt wird, soll abschließend noch auf weitere Studien zu Thermalisierung in nichtintegrierbaren quantenmechanischen Vielteilchensystemen eingegangen werden. Diese gehen zurück auf Gogolin *et al.* [175], Larson [152] und Hamazaki *et al.* [164]. Gogolin *et al.* haben in [175] das Auftreten von Equilibrierung ohne Thermalisierung in Systemen untersucht, die in Subsystem und Bad aufgeteilt sind. Hierunter ist zu verstehen, dass alle lokalen Observablen zwar equilibrieren, jedoch für alle Zeiten die Erinnerung an ihre Anfangswerte behalten, die reduzierte Dichtematrix des Subsystems also nicht thermisch wird für unendlich lange Zeiten. In diesem Zusammenhang wurde von ungefähren Erhaltungsgrößen gesprochen. Diese können auch in nichtintegrierbaren Systemen existieren. Als Ursache hierfür wurde eine fehlende Verschränkung in der Energieeigenbasis genannt und als Beispiel für ein derartiges System die Spin-1/2-XYZ-Kette mit freien Randbedingungen und zufällig gewählten Kopplungen und Feldern betrachtet, beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-1} (J_i^x \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + J_i^y \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + J_i^z \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z) + \sum_{i=1}^N h_i \hat{\sigma}_i^z. \quad (1.28)$$

Die Untersuchungen von Gogolin *et al.* zeigen somit unter anderem, dass auch die Einführung von Unordnung im System nicht zwingend zum Auftreten von Thermalisierung führt.

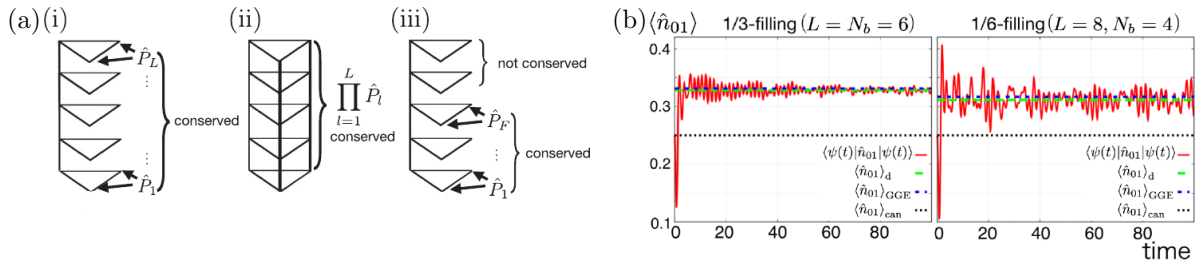


Abbildung 1.13: (a) Von Hamazaki *et al.* betrachtete Realisierungen des Systems von Hard-Core-Bosonen auf Dreiecksgittern. System (i) weist eine extensive Anzahl lokaler Symmetrien auf (Symmetrien in jeder Dreiecksebene), System (ii) eine globale \mathbb{Z}_2 -Symmetrie und System (iii) eine endliche Zahl lokaler Symmetrien (Symmetrien nur in endlich vielen Dreiecksebenen). (b) Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes $\langle \hat{n}_{01} \rangle$ in System (i). \hat{n}_{01} misst dabei die Anzahl an Hard-Core-Bosonen mit Impuls ($k_x = 0, k_y = \pi$). Der stationäre Zustand des Systems kann mit hoher Genauigkeit durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble beschrieben werden, wohingegen sich starke Abweichungen zum kanonischen Gibbs-Ensemble zeigen. Die Abbildungen wurden aus [164] entnommen. *Reprinted with permission from Hamazaki et al., Physical Review E 93, 032116, 2016. Copyright 2016 by the American Physical Society.*

Larson hat in [152] das getriebene Rabi-Modell

$$\hat{H} = \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{\omega}{2} \hat{\sigma}_z + g (\hat{b}^\dagger + \hat{b}) \hat{\sigma}_x + \lambda \hat{\sigma}_x \quad (1.29)$$

untersucht, welches aus einem Spin-1/2 gekoppelt an einzelne bosonische Mode besteht. Hierbei ist ω die Energielücke zwischen den beiden Zuständen des Spins, g die Kopplung zwischen dem Spin und der bosonischen Mode und λ der äußere Antrieb, durch den die \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie aufgehoben wird. Der Quench, durch den das System aus dem Gleichgewicht gebracht wurde, betraf sowohl den Antrieb als auch die Kopplung des Spins an die bosonische Mode. Das Resultat von Larson bestand auch hier in der Beobachtung von Abweichungen von Thermalisierung.

Abschließend seien noch die Untersuchungen von Hamazaki *et al.* in [164] genannt, die sich mit dem Einfluss von Symmetrien innerhalb eines nichtintegrablen Systems auf das Auftreten von Thermalisierung befassen. Zu diesem Zweck wurde ein künstliches Modell betrachtet, welches aus Hard-Core-Bosonen auf einem System aus verbundenen Dreiecksgittern bestand. Übergänge waren dabei zwischen den Positionen innerhalb jedes Dreiecks und zwischen benachbarten Dreiecken möglich. Das Modell ist nichtintegrabel und die in ihm vorhandenen Symmetrien konnten leicht durch Änderung der Kopplungen zwischen den Positionen beeinflusst werden. Hamazaki *et al.* haben auf diese Weise insgesamt drei Fälle realisiert: ein System mit einer extensiven Anzahl lokaler Symmetrien (Symmetrien in jeder Dreiecksebene), ein System mit einer globalen \mathbb{Z}_2 -Symmetrie und ein System mit einer endlichen Zahl lokaler Symmetrien (Symmetrien nur in endlich vielen Dreiecksebenen). Dies ist in Abbildung 1.13 (a) veranschaulicht. Wie Abbildung 1.13 (b) entnommen werden kann, konnte im Fall (i) mit einer extensiven Anzahl lokaler Symmetrien der stationäre Zustand des Systems mit hoher Genauigkeit durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble beschrieben werden, auf das im Folgenden bei den Betrachtungen zu integrablen Systemen noch eingegangen werden wird. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die ETH in jedem Symmetriesektor erfüllt ist. In den anderen beiden Fällen hingegen konnte gezeigt werden, dass das kanonische Gibbs-Ensemble zur Beschreibung des stationären Zustandes geeignet ist. Die Studien von Hamazaki *et al.* zeigen somit, dass auch die innerhalb eines quantenmechanischen Vielteilchensystems vorhandenen Symmetrien einen wesentlichen Einfluss auf das Auftreten von Thermalisierung haben können.

Die genannten Arbeiten stellen nur einen kleinen Ausschnitt der Forschungen auf dem Gebiet des Auftretens von Thermalisierung in nichtintegrablen quantenmechanischen Vielteilchensystemen dar, verdeutlichen jedoch bereits die Komplexität der Thematik. Als zentrale Aussage kann dabei festgehalten werden, dass aus der Nichtintegrabilität eines quantenmechanischen Vielteilchensystems nicht unmittelbar gefolgert werden kann, dass es thermalisiert. Zusammenfassungen des aktuellen Standes der Forschung zum Auftreten von Thermalisierung in quantenmechanischen Vielteilchensystemen können beispielsweise in [176, 177] gefunden werden. Weiterhin haben die vorangegangenen Betrachtungen gezeigt, dass aufgrund der Komplexität der Berechnungen sowie des hohen numerischen Aufwandes nur wenige Studien

zum Auftreten von Thermalisierung in nichtintegrablen Systemen existieren, die auf der expliziten Berechnung der Zeitentwicklung der Systeme beruhen und Systemgrößen jenseits des mittels numerischer Integration der Schrödingergleichung erreichbaren Bereiches betrachten. Hierzu gehören die bereits besprochenen Untersuchungen von Kollath *et al.* des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mithilfe der Anwendung einer zeitabhängigen Dichtematrixrenormierungsgruppe in [91] sowie die Untersuchungen von Carleo *et al.* des ein- und des zweidimensionalen Bose-Hubbard-Modells mithilfe eines Variations-Monte-Carlo-Verfahrens in Realzeit in [98]. Neben diesen bereits genannten Studien existieren noch Studien von Konstantinidis der antiferromagnetischen anisotropen Heisenberg-Kette mithilfe einer Chebyshev-Polynomialentwicklung [178, 179]. In höheren Dimensionen liegen Resultate für einen d -dimensionalen effektiven $O(N)$ -Hamiltonoperator auf Grundlage eines Verfahrens basierend auf Renormierungsgruppen vor [123–125], jedoch kann dieses Verfahren nur nahe dynamischer kritischer Punkte angewendet werden.

Integrable Systeme und das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble

Nach den Betrachtungen zu nichtintegrablen Systemen soll nun auf integrable Systeme eingegangen werden. Ein Überblick über den aktuellen Stand der Forschung bzgl. der Nichtgleichgewichtsdynamik integrierbarer Systeme kann beispielsweise in [128] gefunden werden. Aufgrund der neben der Gesamtenergie vorhandenen zusätzlichen Erhaltungsgrößen ist für integrable Systeme a priori klar, dass sie nicht thermalisieren können. Zur Beschreibung ihres stationären Zustandes hat sich das von Rigol *et al.* in [106] eingeführte *verallgemeinerte Gibbs-Ensemble* (Generalized Gibbs Ensemble, GGE) etabliert, welches die zusätzlichen Erhaltungsgrößen des Systems mitberücksichtigt. Der Dichteoperator des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles lautet

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\tilde{\beta}\hat{H} - \sum_n \lambda_n \hat{I}_n} \quad \text{mit} \quad Z_{\text{GGE}} = \text{Sp} \left\{ e^{-\tilde{\beta}\hat{H} - \sum_n \lambda_n \hat{I}_n} \right\} \quad \text{und} \quad [\hat{I}_n, \hat{H}] = 0. \quad (1.30)$$

Z_{GGE} ist die Zustandssumme des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles. Die mit dem Hamiltonoperator kommutierenden Operatoren \hat{I}_n beschreiben die weiteren Erhaltungsgrößen des Systems neben der Gesamtenergie. Es ist somit

$$\langle \hat{I}_n \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{I}_n | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | e^{i\hat{H}(t-t_0)} \hat{I}_n e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \hat{I}_n | \Psi(t_0) \rangle = \langle \hat{I}_n \rangle_{t_0}. \quad (1.31)$$

Die Lagrange-Multiplikatoren $\tilde{\beta}$ und λ_n sind eindeutig durch die Anfangsbedingungen bestimmt. Mithilfe des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles konnten unter anderem Hard-Core-Bosonen auf Gittern [97, 106–110], freie Bosonen ausgehend von einem thermischen Zustand [114], das eindimensionale Bose-Gas [180], das q-Bosonen-Modell [118] sowie das eindimensionale transversale Ising- und XY-Modell [45, 68] beschrieben werden. In sogenannten freien Theorien, d. h. Systemen mit Hamiltonoperatoren, die durch Transformation auf das System ihrer Eigenmoden diagonalisiert werden können, wird das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble oftmals über die unter der unitären Zeitentwicklung erhaltenen Besetzungszahlen der einzelnen Moden ausgedrückt [107]. Bezeichnet \hat{n}_k den Operator, der die Besetzungszahl der k -ten Mode misst, und μ_k den zugehörigen Lagrange-Multiplikator, so kann das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble gemäß [128] in der Form

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}} e^{-\sum_k \mu_k \hat{n}_k} \quad \text{mit} \quad Z_{\text{GGE}} = \text{Sp} \left\{ e^{-\sum_k \mu_k \hat{n}_k} \right\} \quad \text{und} \quad [\hat{n}_k, \hat{H}] = 0 \quad (1.32)$$

geschrieben werden. Der Zusammenhang zwischen den extensiven Erhaltungsgrößen \hat{I}_n und den Besetzungszahlen \hat{n}_k der Moden ist in [128] für ein fermionisches Tight-Binding-Modell erläutert. Wesentlich ist hierbei eine lineare Beziehung der Erhaltungsgrößen zu den Besetzungszahlen. Es gilt jedoch zu beachten, dass es auch Fälle gibt, in denen lokale Erhaltungsgrößen existieren, die nicht über die Besetzungszahlen ausgedrückt werden können. Als Beispiel hierfür ist in [128] wiederum das fermionische Tight-Binding-Modell mit einer bestimmten Wahl der Parameter angegeben. Das eindimensionale transversale Ising- und XY-Modell können ebenfalls als freie fermionische Theorien formuliert werden. Auf die in [45, 68] erläuterte Darstellung ihres stationären Zustandes mithilfe des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles über die Besetzungszahlen der Moden wird im weiteren Verlauf der Dissertation an geeigneter Stelle eingegangen werden. Ein Review-Artikel über das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble für integrable Systeme auf einem Gitter kann in [181] gefunden werden.

In seiner ursprünglichen Definition berücksichtigt das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble nur lokale Erhaltungsgrößen. Lokale Erhaltungsgrößen sind Erhaltungsgrößen, zu deren Beschreibung im verallgemeinerten Gibbs-Ensemble lokale Operatoren verwendet werden. Neue Erkenntnisse der letzten Jahre zeigen, dass die Beschreibung des stationären Zustandes durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble in seiner ursprünglichen Form mit ausschließlich lokalen Erhaltungsgrößen in Abhängigkeit von dem betrachteten System nicht vollständig ist und erweitert werden muss. So konnte für das anisotrope Spin-1/2-Heisenberg-Modell (XXZ-Modell) [72, 74–77] und das Lieb-Liniger-Modell [77] gezeigt werden, dass das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble unter Berücksichtigung ausschließlich lokaler Erhaltungsgrößen den stationären Zustand des Systems nicht korrekt beschreibt. Als Grund für die beobachteten Abweichungen stellte sich das Vorhandensein bis dato unbekannter quasilokaler Erhaltungsgrößen heraus, die ebenfalls im verallgemeinerten Gibbs-Ensemble berücksichtigt werden müssen. Ihre Existenz wurde beispielsweise für verschiedene feldtheoretische Modelle [182] sowie für das anisotrope Spin-1/2-Heisenberg-Modell [183] nachgewiesen. Eine Zusammenfassung zu quasilokalen Erhaltungsgrößen kann in [184] gefunden werden.

Theorem von Doyon

Die zuvor genannten Resultate führten 2015 zur Formulierung einer mathematischen Theorie zum Auftreten verallgemeinerter Thermalisierung in quantenmechanischen Vielteilchensystemen durch Doyon in [185]. Diese beinhaltet ein Theorem, welches im Folgenden als *Theorem von Doyon* bezeichnet werden wird und das angibt, unter welchen Voraussetzungen in quantenmechanischen Vielteilchensystemen im thermodynamischen Limes verallgemeinerte Thermalisierung auftritt und wie das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble zur Beschreibung ihres stationären Zustandes unter Berücksichtigung quasilokaler Erhaltungsgrößen zu konstruieren ist. Es kann sowohl auf nichtintegrale als auch auf integrable Systeme auf hyperkubischen Gittern beliebiger Dimensionalität in translationsinvarianten Zuständen angewendet werden, sofern ihre Hamiltonoperatoren nur Wechselwirkungsterme endlicher Reichweite enthalten. Im Falle nichtintegrabler Systeme reduziert sich die Aussage des Theorems auf das Auftreten von Thermalisierung gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble. Voraussetzung für die Anwendbarkeit des Theorems von Doyon sind hinreichend starke Clustereigenschaften des Systems, d. h. Korrelationen zwischen Positionen des Gitters müssen hinreichend schnell mit der Entfernung abfallen. Unter anderem wird in [185] gezeigt, dass diese Bedingung für einen exponentiellen Abfall der Korrelationen mit dem Abstand der Spins erfüllt ist. Für die Details des Theorems sei auf [185] verwiesen. Seine Anwendung auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell sowie die sich aus ihm ergebenden Vorhersagen zum Auftreten von Thermalisierung in diesem werden zu Beginn der Betrachtungen zum zweidimensionalen transversalen Ising-Modell besprochen.

Quench Action Approach

Ein weiteres Verfahren zur Untersuchung des stationären Zustandes integrierbarer quantenmechanischer Vielteilchensysteme stellt der Quench Action Approach dar, der 2013 in [51] von Caux und Essler für das eindimensionale transversale Ising-Modell entwickelt wurde. Seitdem wurde das Verfahren von Brockman *et al.* in [79] sowie von Mestyán *et al.* [80] zur Untersuchung des stationären Zustandes des Heisenberg-Modells genutzt. Review-Artikel zum Quench Action Approach können in [186, 187] gefunden werden.

Bemerkung: Bedeutung des thermodynamischen Limes

Vor Beginn der konkreten Betrachtungen zum transversalen Ising-Modell in den folgenden Kapiteln sei noch darauf hingewiesen, dass eine echte Equilibrierung des Systems nur im thermodynamischen Limes auftreten kann. Für endliche Systemgrößen wird es immer periodisch mit der Zeit auftretende Rekurrenz und Revivals geben. Dies wurde beispielsweise bereits in Abbildung 1.6 angedeutet, indem der Erwartungswert der Observable um seinen zeitlichen Mittelwert oszilliert, wobei die Amplitude der Oszillationen ebenfalls zeitabhängig ist. In der Abbildung beeinflussen die Oszillationen den zeitlichen Mittelwert zwar nicht, sofern die Zeitmittelung über ein hinreichend langes Zeitintervall erfolgt, jedoch sind sie dafür verantwortlich, dass in endlichen Systemen nur Equilibrierung im zeitlichen Mittel möglich ist. Die folgenden Erläuterungen zur Bildung des thermodynamischen Limes und der Definition von Thermalisierung orientieren sich an den Ausführungen von Sirker *et al.* in [161].

Zur Untersuchung des stationären Zustandes eines quantenmechanischen Vielteilchensystems wird sein

Zustand im Limes $t \rightarrow \infty$ betrachtet. Da zur Untersuchung des Systems zum Auftreten von Thermalisierung ebenfalls die Bildung des thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ erforderlich ist, erweist sich die Reihenfolge der Grenzwertbildung von $t \rightarrow \infty$ und $N \rightarrow \infty$ als von entscheidender Bedeutung. Der thermodynamische Limes muss hierbei zuerst gebildet werden und erst im Anschluss daran der Grenzwert unendlich langer Zeiten. In Simulationen hingegen ist es leichter, zunächst für verschiedene Systemgrößen sehr lange Zeiten zu betrachten und anschließend durch Vergleich der Resultate mittels Finite-Size-Scaling auf das System im thermodynamischen Limes zu schließen. Um ein System numerisch auf das Auftreten von Thermalisierung untersuchen zu können, gilt es somit, die Frage zu klären, ob

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t \stackrel{?}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \bar{\mathcal{O}}, \quad (1.33)$$

d. h. ob der Gleichgewichtswert erhalten werden kann, indem zuerst über die Zeit gemittelt und erst anschließend der thermodynamische Limes gebildet wird. Diese Gleichheit ist in der Tat nicht allgemein gegeben, sondern hängt von dem betrachteten quantenmechanischen System ab. Ein explizites Gegenbeispiel ist, wie in [188] gezeigt wurde, das eindimensionale transversale Ising-Modell. Dies werden auch die Resultate für das eindimensionale transversale XY-Modell im Rahmen der vorliegenden Dissertation zeigen. Für große nichtintegrale Systeme hingegen wie beispielsweise das zweidimensionale transversale Ising-Modell auf einem hinreichend großen Quadratgitter kann nach [189] davon ausgegangen werden, dass $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t$ immer nahe bei $\bar{\mathcal{O}}$ liegt, d. h. nur eine geringe Varianz des zeitlichen Mittelwertes besteht und die Reihenfolge der Grenzwertbildung keine Rolle spielt. Dies werden auch die Resultate für die Zeitentwicklung verschiedener Observablen im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell zeigen. Ausgehend von diesen Überlegungen haben Sirker *et al.* in [161] die folgenden Bedingungen für das Auftreten von Thermalisierung in quantenmechanischen Vielteilchensystemen formuliert:

- (i) $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t$ wird im Limes $t \rightarrow \infty$ zeitunabhängig und stimmt mit $\bar{\mathcal{O}}$ überein.
- (ii) $\bar{\mathcal{O}}$ stimmt mit dem Erwartungswert des Systems gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble (Thermalisierung) bzw. gemäß dem verallgemeinerten Gibbs-Ensemble (verallgemeinerte Thermalisierung) bei der über die Exzessenergie im System bestimmten effektiven Temperatur T_{eff} überein.

Diese müssen für alle lokalen Observablen für das System im thermodynamischen Limes erfüllt sein. Da im Rahmen numerischer Untersuchungen nur Systeme endlicher Größe sowie endliche Zeiten betrachtet werden können, wird somit insbesondere bei der Betrachtung des nicht analytisch lösbaren zweidimensionalen transversalen Ising-Modell das Ziel darin bestehen, möglichst große Systeme über möglichst lange Zeitintervalle zu simulieren und durch den Vergleich verschiedener Systemgrößen Rückschlüsse auf das System im thermodynamischen Limes zu ziehen.

2 Das transversale Ising- und XY-Modell

Das Ising-Modell geht auf Ernst Ising zurück, der es auf Anregung seines Doktorvaters Wilhelm Lenz im Jahre 1924 erstmals untersuchte [190]. In seiner ursprünglichen Formulierung stellte das Ising-Modell ein klassisches Modell dar, dessen Intention die Beschreibung des Ferromagnetismus in Festkörpern war. Es umfasste klassische Spins, genannt Elementarmagnete, die in einer Dimension entlang einer linearen Kette bzw. in höheren Dimensionen auf einem Gitter angeordnet sind. Eine Wechselwirkung wurde dabei nur zwischen unmittelbar benachbarten Spins angenommen. Mit der Entwicklung der Quantenmechanik in den folgenden Jahren entstand auch eine quantenmechanische Formulierung des Ising-Modells, die Systeme aus Spin-1/2 beschreibt. Diese weisen im Gegensatz zu den klassischen Elementarmagneten keine kontinuierliche Orientierung auf, sondern befinden sich in einem der zwei möglichen Zustände up und down. Eine Wechselwirkung zwischen den Spins besteht hierbei in x -Richtung zwischen nächsten Nachbarn. In einer Dimension ist das quantenmechanische Ising-Modell exakt lösbar. Infolgedessen entwickelte es sich im Laufe der Zeit zu einem Standardmodell der theoretischen Quantenmechanik für Vielteilchensysteme aus Spin-1/2, an dem neue Konzepte erprobt wurden. Weiterhin entstanden Verallgemeinerungen, die beispielsweise die Anwesenheit eines externen transversalen Feldes berücksichtigen (transversales Ising-Modell), langreichweitige Kopplungen zwischen Spins umfassen (langreichweitiges Ising-Modell) oder eine Wechselwirkung der Spins nicht nur in x -Richtung, sondern auch in y -Richtung betrachten (XY-Modell). Die exakte Lösbarkeit des Systems in einer Dimension bleibt dabei sowohl für das transversale Ising-Modell als auch für das transversale XY-Modell erhalten.

Die im einleitenden Kapitel genannten Studien der Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising- und XY-Modells sind abgesehen von den Arbeiten von Barouch und McCoy [63–66] alle jüngeren Datums. Frühere Untersuchungen haben sich vor allem mit den Gleichgewichtseigenschaften der Systeme beschäftigt. Von besonderer Bedeutung für die Untersuchung des eindimensionalen Systems ist dabei eine Arbeit von Lieb, Schultz und Mattis aus dem Jahre 1961 [191], in der ein Verfahren entwickelt wurde, um den Hamiltonoperator des eindimensionalen XY-Modells ohne Transversalfeld zu diagonalisieren. Dieses Verfahren kann auf beliebige quadratische Formen von Fermioperatoren angewendet werden. Unter anderem hat es Pfeuty 1970 in [192] verwendet, um das transversale Ising-Modell in einer Dimension zu studieren, für das elementare Anregungen des Systems, die Grundzustandsenergie sowie Korrelationsfunktionen betrachtet wurden. Weiterhin bildete das Verfahren die Grundlage des Vorgehens von Barouch und McCoy zur Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen XY-Modells in einer Dimension in [63–66]. Aufgrund seiner großen Bedeutung zur analytischen Lösung des eindimensionalen transversalen Ising- und XY-Modells sowie zur Bestimmung der Zeitentwicklung wird auf das Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis im weiteren Verlauf der Dissertation noch detailliert eingegangen werden. Weitere Studien beschäftigten sich mit dem Grundzustand des eindimensionalen transversalen Ising-Modells und dem Verlauf seines Ordnungsparameters und der Korrelationsfunktionen in der Umgebung des kritischen Punktes [193, 194]. Weiterhin wurde der Einfluss der Temperatur auf die Korrelationen im transversalen Ising-Modell [195] sowie im XY-Modell [196] untersucht. Ebenfalls intensiv untersucht wurden die spontane Magnetisierung und Korrelationsfunktionen des zweidimensionalen Ising-Modells [197–203]. Neben den Korrelationsfunktionen befassen sich jüngere Studien mit Verschränkung zwischen Spins. Diese wurde beispielsweise in den Jahren 2003 und 2004 in [204, 205] für das eindimensionale transversale XY-Modell untersucht.

Neben der Beschreibung des Ferromagnetismus in Festkörpern könnte dem transversalen Ising-Modell in Zukunft auch eine wesentliche Rolle bei der in der Einleitung beschriebenen Entwicklung von Quantencomputern zukommen. Die Spin-1/2 können mit Qubits identifiziert werden. Dies wurde beispielsweise in [59] durch Navez *et al.* gemacht, die die Zeitentwicklung der Verschränkung zweier Qubits in einem Quantenregister mithilfe des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells unter Verwendung einer Large Coordination Number Expansion beschrieben haben. Da jedoch noch insbesondere in Bezug auf die Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising-Modells in höheren Dimensionen nur wenige Resultate vorliegen und noch viele offene Fragen bestehen, stellt die Untersuchung des transversalen Ising-Modells auch in der heutigen Zeit ein wichtiges Forschungsgebiet dar.

Im Rahmen der vorliegenden Dissertation wird die Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen XY-Modells in einer Dimension auf einer Kette der Länge L mit freien (lineare Kette) bzw. periodischen Randbedingungen (geschlossene Kette) sowie die Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising-Modells in zwei Dimensionen auf einem Quadratgitter der Kantenlänge L mit periodischen Randbedingungen (Torus) untersucht. Eine Wechselwirkung bestehe dabei nur zwischen nächsten Nachbarn. Der

Hamiltonoperator des Systems kann allgemein in der Form

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \left\{ \frac{1+\gamma}{2} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x + \frac{1-\gamma}{2} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^y \right\}}_{\hat{H}_{\text{int}}} \underbrace{-\frac{h}{2} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z}_{\hat{H}_{\text{ext}}} \quad (2.1)$$

geschrieben werden. Dabei ist $\mathbf{R} \in \{1, 2, \dots, L\}^d$ mit $d \in \{1, 2\}$ der Dimensionalität des Systems. Der erste Summand \hat{H}_{int} beschreibt die Wechselwirkung der Spins untereinander mit der Kopplungskonstante $J \geq 0$. Die Summation läuft über alle Paare von nächsten Nachbarn. Die Konstante $0 \leq \gamma \leq 1$ beschreibt die Anisotropie der Wechselwirkung zwischen den Spins. Für das Ising-Modell ist $\gamma = 1$, d. h. die Wechselwirkung zwischen den Spins in y -Richtung verschwindet und es besteht nur eine Wechselwirkung in x -Richtung. Vom XY-Modell spricht man für $0 < \gamma < 1$. Es gehört der gleichen Universalitätsklasse an wie das Ising-Modell. Verschwindet die Anisotropie, d. h. ist $\gamma = 0$, so ist die Wechselwirkung der Spins in x -Richtung genauso stark wie in y -Richtung. In diesem Fall spricht man vom XX-Modell, welches einer anderen Universalitätsklasse angehört als das Ising- und das XY-Modell. Der zweite Summand \hat{H}_{ext} beschreibt die Wechselwirkung der Spins mit dem externen transversalen Feld, dessen Stärke durch $h \geq 0$ gegeben ist. Die Operatoren $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$, $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y$ und $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ sind die Pauli-Spinoperatoren [206] für die Position \mathbf{R} , deren Matrixdarstellungen in der Basis der Eigenzustände von $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ lauten:

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_{\mathbf{R}}, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_{\mathbf{R}}, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_{\mathbf{R}}. \quad (2.2)$$

Die Gesamtzahl der Spins im System werde mit N bezeichnet. In einer Dimension ist somit $N = L$ und in zwei Dimensionen $N = L^2$. Da das System aus Spin-1/2 besteht, ist der Hilbertraum \mathcal{H} von der Dimension $\dim(\mathcal{H}) = 2^N$, wächst also exponentiell mit der Systemgröße.

Als Basis zur Beschreibung des Zustandes des Systems wird die \mathbf{x} -Basis $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ verwendet. Darunter ist die Basis des Hilbertraumes zu verstehen, die aus den Eigenzuständen des Operators $\hat{\Sigma}^x = \prod_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ besteht. In dieser fragt der Pauli-Spinoperator $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ die Orientierung des Spins an der Position \mathbf{R} ab, wohingegen die Pauli-Spinoperatoren $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y$ und $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ den Spin an der Position \mathbf{R} umklappen und im Falle von $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y$ noch eine Phase hinzufügen:

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x |\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = -|\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x, \quad (2.3a)$$

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = -i |\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y |\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = i |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x, \quad (2.3b)$$

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = |\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x, \quad \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z |\dots \downarrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x = |\dots \uparrow_{\mathbf{R}} \dots\rangle_x. \quad (2.3c)$$

Sowohl das transversale Ising-Modell als auch das transversale XY-Modell weisen eine globale \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \rightarrow -\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$, $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y \rightarrow -\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y$ und $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \rightarrow \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ auf. Diese wird durch den unitären Operator $\hat{\Sigma}^z = \prod_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ vermittelt. Wegen $[\hat{H}, \hat{\Sigma}^z] = 0$ ergibt sich $\hat{\Sigma}^z \hat{H} \hat{\Sigma}^z = \hat{H}$. Weiterhin besitzt insbesondere das Modell in zwei Dimensionen auf dem Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen ausgeprägte räumliche Symmetrien. Hierzu gehören Translations-, Rotations- und Spiegelsymmetrien. Die Erzeuger der Symmetrietransformationen können aus den unitären Transpositionsoperatoren $\hat{T}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \vec{\sigma}_{\mathbf{R}} \cdot \vec{\sigma}_{\mathbf{R}'})$ gebildet werden, die jeweils zwei Gitterplätze vertauschen $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \leftrightarrow \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x$, $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y \leftrightarrow \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^y$ und $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \leftrightarrow \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^z$. Bei der Konstruktion der Erzeuger ist darauf zu achten, dass sie ebenfalls mit dem Hamiltonoperator kommutieren müssen.

Ferromagnetische Ordnung und Phasendiagramm

Das transversale Ising-Modell zeigt im thermodynamischen Limes einen Phasenübergang zwischen einer ferromagnetischen Phase mit langreichweitiger Ordnung und einer ungeordneten paramagnetischen Phase. Die ferromagnetische Ordnung entsteht durch spontane Symmetriebrechung der globalen \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie im thermodynamischen Limes. Tritt keine spontane Symmetriebrechung auf, d. h. werden endliche Systeme betrachtet bzw. das System im thermodynamischen Limes in der paramagnetischen Phase, so sind die Eigenzustände des Hamiltonoperators auch Eigenzustände von $\hat{\Sigma}^z$ und bleiben es unter unitärer Zeitentwicklung. Hierbei ist zwischen Eigenzuständen mit gerader und ungerader Symmetrie zu unterscheiden. Die geraden Eigenzustände von \hat{H} sind Eigenzustände von $\hat{\Sigma}^z$ zum Eigenwert $+1$, die ungeraden Eigenzustände von \hat{H} sind Eigenzustände von $\hat{\Sigma}^z$ zum Eigenwert -1 . Im Falle des

eindimensionalen Modells wird sich zeigen, dass die Symmetrie eines Eigenzustandes durch die Anzahl der angeregten Moden bestimmt ist. Im Falle einer geraden Anzahl an Anregungen ist der Zustand gerade, im Falle einer ungeraden Anzahl ungerade. Der Grundzustand liegt somit im Unterraum der geraden Eigenzustände. Im thermodynamischen Limes sind die Eigenzustände des Hamiltonoperators in der ferromagnetischen Phase aufgrund der spontanen Symmetriebrechung keine Eigenzustände von $\hat{\Sigma}^z$ mehr und der Grundzustand ist energetisch zweifach entartet. Die beiden Zustände werden mit $|\Psi_0^\pm\rangle$ bezeichnet und durch die Wirkung des Operators $\hat{\Sigma}^z$ ineinander überführt: $\hat{\Sigma}^z |\Psi_0^\pm\rangle = |\Psi_0^\mp\rangle$. Das System wird aus diesem Grund in der ferromagnetischen Phase als *gapless* bezeichnet. In endlichen Systemen liegen für die Bereiche des Phasendiagramms, in denen im thermodynamischen Limes ferromagnetische Ordnung auftritt, der Grundzustand und der erste angeregte Zustand energetisch nahe beieinander mit einer größeren Energielücke zum nächsthöheren angeregten Zustand, wobei die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand mit zunehmender Systemgröße verschwindet. In der paramagnetischen Phase ist der Grundzustand nicht entartet. Zwischen ihm und dem ersten angeregten Zustand besteht unabhängig von der Systemgröße eine Energielücke. Das System wird infolgedessen als *gapped* bezeichnet. Der Ordnungsparameter des Phasenüberganges zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase ist der Erwartungswert des Operators der Magnetisierung pro Spin in x -Richtung

$$\hat{\mu}^x = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x, \quad (2.4)$$

der im Grundzustand $|\Psi_0^\pm\rangle$ bzw. $|\Psi_0\rangle$ des Systems gebildet wird. Für periodische Randbedingungen genügt die Betrachtung des Erwartungswertes von $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ für eine einzelne Position des Systems. Der Operator $\hat{\mu}^x$ ist ungerade in Bezug auf die \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie, da $\hat{\Sigma}^z \hat{\mu}^x \hat{\Sigma}^z = -\hat{\mu}^x$. Sein Erwartungswert ist somit verschieden von null in der ferromagnetischen Phase aufgrund der spontanen Symmetriebrechung und verschwindet in der paramagnetischen Phase.

Da in endlichen Systemen keine spontane Symmetriebrechung auftritt, verschwindet in diesen der Erwartungswert der Magnetisierung in Eigenzuständen des Hamiltonoperators. Aus diesem Grund wird in endlichen Systemen der sogenannte *lokale Ordnungsparameter* betrachtet, der auch als *lokale Magnetisierung* bezeichnet wird. Bei ihm handelt es sich ebenfalls um den Erwartungswert von $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ für eine einzelne Position des Systems, jedoch erfolgt die Betrachtung in Gegenwart eines Longitudinalfeldes h_ℓ im Grenzfall verschwindenden Feldes:

$$m_{\mathbf{R}}^x = \lim_{h_\ell \rightarrow 0^+} \langle \Psi_0 | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x | \Psi_0 \rangle. \quad (2.5)$$

Durch das Longitudinalfeld ergibt sich eine Vorzugsrichtung der Spins, aufgrund derer die Symmetrie gebrochen wird und der Erwartungswert auch für endliche Systemgröße nicht verschwindet. In [198] wurde gezeigt, dass der lokale Ordnungsparameter an der Position \mathbf{R} als das folgende Nebendiagonalelement von $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ geschrieben werden kann:

$$m_{\mathbf{R}}^x = \langle \Psi_0 | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x | \Psi_1 \rangle. \quad (2.6)$$

$|\Psi_1\rangle$ ist der erste angeregte Zustand des Systems. In der ferromagnetischen Phase weisen Operatoren, die die beiden energetisch niedrigsten, dicht beieinander liegenden Eigenzustände des Hamiltonoperators koppeln, langreichweitige Korrelationen auf [207]. Die lokale Magnetisierung gemäß (2.6) kann daher als Ordnungsparameter für den Phasenübergang von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase genutzt werden. Für periodische Randbedingungen ist der lokale Ordnungsparameter unabhängig von der konkreten Position \mathbf{R} . Für das System mit freien Randbedingungen treten für hinreichend große Kettenlänge nur nahe des Randes Abweichungen vom Wert in der Mitte der Systems auf.

Für $h = 0$ ergeben sich energetische Entartungen der Eigenzustände des Hamiltonoperators. Der Grundzustand ist energetisch zweifach entartet. Für das endliche System ohne Symmetriebrechung ist somit unter Beachtung der Tatsache, dass die Zustände Eigenzustände von $\hat{\Sigma}^z$ sind,

$$|\Psi_0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle_x \right), \quad (2.7a)$$

$$|\Psi_0^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x - |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle_x \right). \quad (2.7b)$$

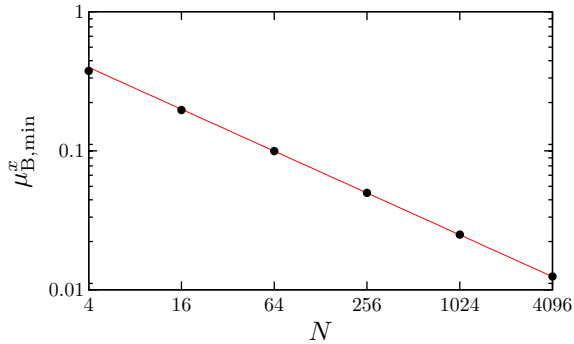


Abbildung 2.1: Doppeltlogarithmische Auftragung des Wertes der unteren Schranke $\mu_{\text{B,min}}^x$ des Betrages der Magnetisierung gemäß (2.12) in Abhängigkeit von der Systemgröße N . Wie der durch die rote Gerade dargestellte Least-Square-Fit mit $a \cdot N^{-1/2}$ zeigt, ist der Wert von $\mu_{\text{B,min}}^x$ umgekehrt proportional zur Wurzel der Systemgröße.

$|\Psi_0^+\rangle$ ist Eigenzustand des Operators $\hat{\Sigma}^z$ zum Eigenwert $+1$ und $|\Psi_0^-\rangle$ Eigenzustand zum Eigenwert -1 . Bei der Berechnung der lokalen Magnetisierung wird $|\Psi_0^+\rangle = |\Psi_0\rangle$ und $|\Psi_0^-\rangle = |\Psi_1\rangle$ gesetzt. Im thermodynamischen Limes hingegen ist für $h = 0$

$$|\Psi_0^+\rangle = |\uparrow\uparrow \dots\rangle_x, \quad (2.8a)$$

$$|\Psi_0^-\rangle = |\downarrow\downarrow \dots\rangle_x, \quad (2.8b)$$

sodass wie gefordert $\hat{\Sigma}^z |\Psi_0^\pm\rangle = |\Psi_0^\pm\rangle$ gilt.

Ist die Berechnung des Matrixelements des lokalen Ordnungsparameters nicht möglich, da der erste angeregte Zustand nicht bekannt ist oder Erwartungswerte für das System bei endlicher Temperatur $T > 0$ mithilfe des im weiteren Verlauf der vorliegenden Dissertation beschriebenen Monte-Carlo-Algorithmus bestimmt werden, so wird statt der lokalen Magnetisierung der Betrag der Magnetisierung $\hat{\mu}_{\text{B}}^x$ als Ordnungsparameter verwendet. Der Operator $\hat{\mu}_{\text{B}}^x$ ergibt sich aus $\hat{\mu}^x$ gemäß

$$\hat{\mu}_{\text{B}}^x = \sum_{\mathbf{x}} |\langle \mathbf{x} | \hat{\mu}^x | \mathbf{x} \rangle| |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|. \quad (2.9)$$

Bei der Bestimmung des Betrages der Magnetisierung eines Zustands $|\Psi\rangle$ des Systems wird dieser also in der \mathbf{x} -Basis dargestellt und jedem Basiszustand der Betrag seiner Magnetisierung zugewiesen. Hierbei gilt es zu beachten, dass der Erwartungswert von $\hat{\mu}_{\text{B}}^x$ im Grundzustand in der paramagnetischen Phase nicht verschwindet, sondern gegen eine von der Systemgröße abhängige untere Schranke $\mu_{\text{B,min}}^x$ konvergiert, je weiter sich das System von der ferromagnetischen Phase entfernt. Der Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung liegt also im Intervall $[\mu_{\text{B,min}}^x, 1]$. Um zu erreichen, dass das Intervall unabhängig von der Systemgröße wird und der Erwartungswert wie für einen Ordnungsparameter gefordert im Intervall $[0, 1]$ liegt, sodass Systeme verschiedener Größe miteinander verglichen werden können, wird der Betrag der Magnetisierung renormiert gemäß

$$\hat{\mu}_{\text{BR}}^x = \frac{\hat{\mu}_{\text{B}}^x - \mu_{\text{B,min}}^x}{1 - \mu_{\text{B,min}}^x}. \quad (2.10)$$

Die von der Systemgröße abhängige untere Schranke $\mu_{\text{B,min}}^x$ entspricht dem Erwartungswert von $\hat{\mu}_{\text{B}}^x$ im vollständig paramagnetischen Zustand. Bei diesem handelt es sich um den Zustand, in dem alle Spins in Richtung des externen transversalen Feldes ausgerichtet sind. Ausgedrückt in der \mathbf{x} -Basis ist dieser Zustand die symmetrische Überlagerung aller Basiszustände:

$$|\Psi_{\text{para}}\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle. \quad (2.11)$$

Für die untere Schranke $\mu_{\text{B,min}}^x$ ergibt sich damit

$$\mu_{\text{B,min}}^x = \langle \Psi_{\text{para}} | \hat{\mu}_{\text{B}}^x | \Psi_{\text{para}} \rangle = \frac{1}{2^N} \sum_{m=0}^N \binom{N}{m} \left| \frac{N-2m}{N} \right| = \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{m=0}^{N/2-1} \binom{N}{m} \frac{N-2m}{N}. \quad (2.12)$$

m bezeichnet hierbei die Anzahl der Spins eines Basiszustandes der \mathbf{x} -Basis, die sich im Zustand down befinden. $\mu_{\text{B,min}}^x$ skaliert mit der Systemgröße gemäß $\mu_{\text{B,min}}^x \sim 1/\sqrt{N}$ und ist unabhängig von der Dimensionalität des Systems. Dies ist in Abbildung 2.1 durch eine doppeltlogarithmische Auftragung von

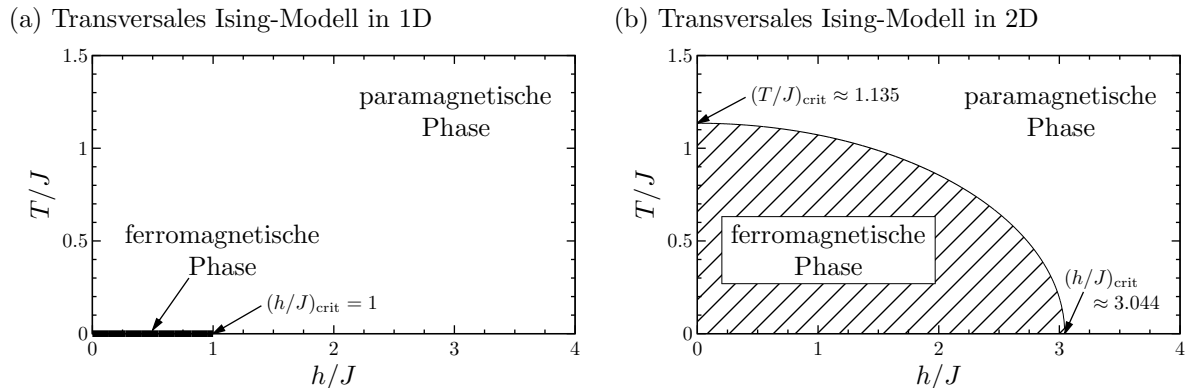


Abbildung 2.2: Phasendiagramm des (a) eindimensionalen und (b) zweidimensionalen transversalen Ising-Modells. Der schraffierte Bereich kennzeichnet die ferromagnetische Phase, der unerschraffierte Bereich die paramagnetische Phase. Für das eindimensionale transversale Ising-Modell kann ferromagnetische Ordnung nur für $T = 0$ existieren, wohingegen für das zweidimensionale transversale Ising-Modell ferromagnetische Ordnung auch für kleine Verhältnisse h/J und T/J auftritt.

$\mu_{B,\min}^x$ gegen die Anzahl N der Spins im System veranschaulicht.

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ geht somit der renormierte Betrag der Magnetisierung in den Betrag der Magnetisierung über. Dieser wiederum stimmt im thermodynamischen Limes aufgrund der spontanen Symmetriebrechung in der ferromagnetischen Phase mit dem Erwartungswert der Magnetisierung überein.

Für eine lineare Kette mit freien Randbedingungen schließlich besteht bei hinreichend großer Kettenlänge noch die Möglichkeit, die Korrelationsfunktion zwischen dem ersten und dem letzten Spin der Kette als Ordnungsparameter für den Phasenübergang zu verwenden [191]:

$$C_{1,L}^{xx} = \langle \Psi_0 | \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_L^x | \Psi_0 \rangle . \quad (2.13)$$

Einflussgrößen auf das Auftreten ferromagnetischer Ordnung im System sind neben dem Verhältnis h/J des transversalen Feldes zur Kopplungskonstante auch die Temperatur T des Systems. Der Gleichgewichtsphasenübergang für $T = 0$ tritt für das eindimensionale transversale Ising-Modell für $h/J = 1$ auf. In zwei Dimensionen ist der Phasenübergang nicht exakt bekannt, konnte jedoch mithilfe verschiedener Verfahren mit hoher Genauigkeit zu $h/J \approx 3.044$ bestimmt werden (Reihenentwicklung [194], Dichtematrixrenormierungsgruppe [208], Quanten-Monte-Carlo [209]). Für endliche Temperaturen $T > 0$ verschwindet im eindimensionalen transversalen Ising-Modell die ferromagnetische Ordnung, wohingegen im zweidimensionalen Modell für kleine Verhältnisse h/J und T/J ein Bereich mit ferromagnetischer Ordnung existiert. Der Übergang von der ferromagnetischen zur paramagnetischen Phase in Abwesenheit eines Transversalfeldes ($h = 0$) wurde durch Onsager zu $(T/J)_{\text{crit}} = 1/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 1.135$ bestimmt [197]. In Abbildung 2.2 sind die Phasendiagramme für das transversale Ising-Modell in einer und in zwei Dimensionen schematisch dargestellt. Für das transversale XY-Modell in einer Dimension ist der Phasenübergang gegenüber dem transversalen Ising-Modell nicht verschoben.

Das Verschwinden langreichweitiger ferromagnetischer Ordnung im eindimensionalen transversalen Ising-Modell bei endlicher Temperatur sowie die Möglichkeit der Existenz langreichweitiger ferromagnetischer Ordnung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell auch bei endlichen Temperaturen und kleinen Verhältnissen von h/J kann anhand einer einfachen Betrachtung der freien Energie $F = E - TS$ nach Gitterman [210, 211] verstanden werden. Hierbei wird der Einfachheit halber das System ohne Transversalfeld betrachtet. Die Überlegungen beruhen auf einer Betrachtung des Einflusses des Umklapps von Spins auf die freie Energie F des Systems. Der stabile Zustand des Systems entspricht dem Minimum der freien Energie F für die gegebenen Parameter. Bei niedrigen Temperaturen ist die Energie E der dominante Beitrag zur freien Energie F . Das Minimum von F liegt somit nahe dem Minimum von E , welches einem geordneten Zustand entspricht. Bei hohen Temperaturen hingegen wird die freie Energie durch die Entropie S dominiert und F erreicht sein Minimum nahe dem Maximum von S . Die Entropie wiederum ist maximal für das ungeordnete System. Bei der kritischen Temperatur T_{crit} halten sich der die Ordnung des Systems begünstigende Einfluss von E und der die Unordnung begünstigende Einfluss

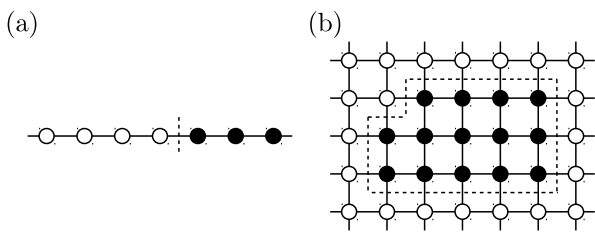


Abbildung 2.3: (a) Konfiguration des eindimensionalen Ising-Modells mit freien Randbedingungen und einer einzelnen Domänengrenze. (b) Konfiguration des zweidimensionalen Ising-Modells mit freien Randbedingungen mit einem zusammenhängenden Bereich an Spin down. Die Kantenlänge des Bereiches der Spin down betrage ℓ . Die Abbildung wurde [211] nachempfunden.

von S die Waage und die kritische Temperatur kann qualitativ durch

$$T_{\text{crit}} \approx \frac{\Delta E}{\Delta S} \quad (2.14)$$

abgeschätzt werden. Es wird nun die Änderung ΔF der freien Energie dadurch betrachtet, dass der vollständig geordnete Zustand, in dem alle Spins parallel zueinander orientiert sind, in einen der in Abbildung 2.3 dargestellten Zustände übergeht, in denen jeweils ein zusammenhängender Bereich an Spins umgeklappt wurde. Dabei werden freie Randbedingungen angenommen. Im Falle des eindimensionalen Ising-Modells in Abbildung 2.3 (a) handelt es sich bei den betrachteten Zuständen um Zustände mit einer einzelnen Domänengrenze. Die Energie des Systems ändert sich durch die Domänengrenze um $\Delta E = J$. Die Anzahl W der möglichen Konfigurationen mit einer einzelnen Domänengrenze ist durch die Anzahl der Kopplungen im System gegeben, welche $N - 1$ beträgt. Somit ist $\Delta S = \ln(W) = \ln(N - 1)$. Die Änderung der freien Energie des eindimensionalen Ising-Modells durch den Übergang von dem vollständig geordneten Zustand in einen Zustand mit einer einzelnen Domänengrenze ist infolgedessen gegeben durch

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = J - T \ln(N - 1) . \quad (2.15)$$

Dieser Wert wird negativ, wenn $T/J > 1/\ln(N - 1)$, d. h. im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ strebt $(T/J)_{\text{crit}}$ gegen null, sodass ferromagnetische Ordnung nur für $T = 0$ existieren kann. Im Falle des zweidimensionalen Ising-Modell wird in Abbildung 2.3 (b) ein Zustand mit einem zusammenhängenden Bereich an Spin down betrachtet, dessen Kantenlänge ℓ betrage. Die Energie des Systems wird somit durch den Übergang vom vollständig geordneten Zustand in den beschriebenen Zustand um $\Delta E = J\ell$ erhöht. Die Anzahl W der möglichen Konfigurationen mit einem zusammenhängenden Bereich an Spin down mit Kantenlänge ℓ beträgt ungefähr $3^\ell N$, denn von jedem Gitterpunkt kann die Grenze des Bereiches der Spin down in drei Richtungen fortgesetzt werden und der Bereich der Spin down kann innerhalb des Gesamtsystems verschoben werden, wodurch sich der Faktor N ergibt. Bei dieser Näherung werden die Notwendigkeit einer geschlossenen Umrandung des Bereiches der Spin down sowie die Tatsache, dass sich die Umrandung nicht selbst schneiden darf, vernachlässigt. Weiterhin ergeben sich durch die freien Randbedingungen Einschränkungen in Bezug auf die Verschiebung des Bereiches der Spin down, sodass in einer exakten Betrachtung der mit N angegebene Faktor ebenfalls kleiner sein muss. Für die hier gemachte einfache Überlegung ist die Näherung jedoch ausreichend. Es ergibt sich somit durch den Übergang vom vollständig geordneten Zustand in den Zustand mit einem zusammenhängenden Bereich an Spin down mit Kantenlänge ℓ eine Änderung der Entropie um $\Delta S = \ln(3^\ell N)$ und damit eine Änderung der freien Energie des Systems um

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = \ell[J - T \ln(3)] - T \ln(N) . \quad (2.16)$$

Liegt ℓ in der Größenordnung von N , so kann der Summand $-T \ln(N)$ vernachlässigt werden. ΔF wird in der gemachten Näherung somit auch im thermodynamischen Limes negativ, wenn $T/J > 1/\ln(3)$, d. h. der Phasenübergang von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase findet bei einer endlichen Temperatur statt. Der durch diese einfache Betrachtung und die gemachten Näherungen bestimmte kritische Wert von $(T/J)_{\text{crit}} = 1/\ln(3)$ stimmt bereits gut mit dem exakten Ergebnis $(T/J)_{\text{crit}} = 1/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 1.135$ von Onsager aus [197] überein. In Anwesenheit eines externen transversalen Feldes sind diese einfachen Überlegungen nicht mehr möglich.

Wie bereits erläutert wurde, besteht in der paramagnetischen Phase eine Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand. Das System wird infolgedessen als gapped bezeichnet. In der ferromagnetischen Phase hingegen sind der Grundzustand und der erste angeregte Zustand

im thermodynamischen Limes entartet und das System wird als gapless bezeichnet. In [207, 212] wurde gezeigt, dass Korrelationen im Grundzustand quantenmechanischer Systeme, die eine Energielücke aufweisen, exponentiell clustern, d. h. die Korrelationen einen exponentiellen Abfall mit dem Abstand der betrachteten Positionen zeigen. Der Wert der Korrelationen liegt dabei bereits für kleine Abstände nahe bei null, sodass weiter voneinander entfernte Positionen effektiv unkorreliert sind. Dies erklärt den Begriff des Clusters: Innerhalb des Systems bestehen ausgehend von einer Position als Referenz Cluster mit endlicher Ausdehnung und einer endlichen Zahl Positionen, die mit der Referenzposition korreliert sind. Aus den Resultaten von Kliesch *et al.* [213] folgt, dass auch thermische Zustände in der paramagnetischen Phase exponentiell clustern. Innerhalb der ferromagnetischen Phasen fallen Korrelationen zwischen den Spins zwar ebenfalls bis zu einem gewissen Abstand der betrachteten Positionen ab, erreichen dann jedoch einen festen, von null verschiedenen Wert. Die genaue Form des Abfalls ist dabei im Gegensatz zur paramagnetischen Phase nicht bekannt. Der Grenzwert für große Abstände ist durch das Quadrat der Magnetisierung des Systems gegeben [66].

Erhaltungsgrößen

Einen weiteren wesentlichen Unterschied zwischen dem transversalen Ising-Modell in einer und in zwei Dimensionen stellen die vorhandenen Erhaltungsgrößen dar. Während das zweidimensionale transversale Ising-Modell nichtintegrierbar ist, d. h. in ihm nur die Gesamtenergie unter unitärer Zeitentwicklung erhalten und somit Thermalisierung möglich ist, sind das eindimensionale transversale Ising- und XY-Modell aufgrund der Existenz weiterer Erhaltungsgrößen integrierbar und können infolgedessen nicht thermalisieren. In [214, 215] wurde gezeigt, dass das eindimensionale transversale Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen im thermodynamischen Limes unendlich viele Erhaltungsgrößen hat. Diese können nach [128] geschrieben werden in der Form

$$\hat{I}_n^+ = -\frac{J}{2} \sum_i \left(\hat{S}_{i,i+n}^{xx} + \hat{S}_{i,i+n-2}^{yy} \right) - \frac{h}{2} \sum_i \left(\hat{S}_{i,i+n-1}^{xx} + \hat{S}_{i,i+n-1}^{yy} \right) = \sum_i \hat{\mathcal{I}}_{n,i}^+ \quad (2.17a)$$

$$\hat{I}_n^- = -\frac{J}{2} \sum_i \left(\hat{S}_{i,i+n}^{xy} - \hat{S}_{i,i+n}^{yx} \right) = \sum_i \hat{\mathcal{I}}_{n,i}^- \quad (2.17b)$$

mit

$$\hat{S}_{i,i+n}^{\alpha\beta} = \hat{\sigma}_i^\alpha \left[\prod_{j=1}^{n-1} \hat{\sigma}_{i+j}^z \right] \hat{\sigma}_{i+n}^\beta \quad \text{und} \quad \hat{S}_{i,i}^{yy} = -\hat{\sigma}_i^z. \quad (2.18)$$

Die \hat{I}_n^+ und \hat{I}_n^- müssen bei der Konstruktion des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles zur Beschreibung des stationären Zustandes des transversalen Ising-Modells in einer Dimension berücksichtigt werden. Wie bereits erwähnt wurde, können die Erhaltungsgrößen in freien Theorien auch über die unter unitärer Zeitentwicklung erhaltenen Besetzungszahlen der Moden des Hamiltonoperators ausgedrückt werden. Dieses Vorgehen wird im Rahmen der vorliegenden Dissertation bei den Betrachtungen zum eindimensionalen transversalen XY-Modell angewendet.

3 Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen XY-Modells in einer Dimension

3.1 Diagonalisierung des Hamiltonoperators

Der Hamiltonoperator des eindimensionalen transversalen XY-Modells kann durch Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden. Das hierzu verwendete Verfahren basiert auf einer Arbeit von Lieb, Schultz und Mattis aus dem Jahre 1961 [191] und reduziert die Diagonalisierung des Hamiltonoperators auf die Diagonalisierung zweier Matrizen, deren Zeilen- und Spaltenzahl linear mit der Systemgröße anwächst entgegen dem exponentiellen Wachstum der Dimensionalität des Hilbertraumes mit der Systemgröße. Betrachtet werden sowohl das System mit freien als auch das System mit periodischen Randbedingungen. Das auf der Arbeit von Lieb, Schultz und Mattis aufbauende Verfahren kann für beide Randbedingungen angewendet werden. Die folgenden Ausführungen für das transversale XY-Modell mit freien Randbedingungen orientieren sich an denjenigen in der Diplomarbeit des Autors der vorliegenden Dissertation [216]. Für das System mit periodischen Randbedingungen wird eine auf Barouch und McCoy [63–66] zurückgehende Abwandlung des Verfahrens von Lieb, Schultz und Mattis vorgestellt, durch die keine Matrixdiagonalisierung erforderlich ist. Bei der hier gezeigten Darstellung dieses Verfahrens handelt es sich um eine Verallgemeinerung des Vorgehens von Rossini *et al.* in [41] vom eindimensionalen transversalen Ising-Modell auf das transversale XY-Modell. Weiterhin wird ein von Iglói und Turban in [217] für das transversale Ising-Modell entwickeltes, ebenfalls auf dem Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis basierendes Verfahren erläutert, das in [216] bereits auf das transversale XY-Modell mit freien Randbedingungen erweitert wurde. Dieses Verfahren kann sowohl auf das eindimensionale transversale XY-Modell mit freien Randbedingungen als auch auf das eindimensionale transversale XY-Modell mit periodischen Randbedingungen angewendet werden und involviert die Diagonalisierung nur einer einzelnen Matrix, deren Zeilen- und Spaltenzahl durch die zweifache Systemgröße gegeben ist. Dieses Verfahren erfordert einen höheren Rechenaufwand als das ursprüngliche Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis, bietet jedoch den Vorteil, dass das relative Vorzeichen der Eigenvektoren der beiden im Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis auftretenden Matrizen unmittelbar bekannt ist.

3.1.1 Freie Randbedingungen

Den Ausgangspunkt der Umformungen bildet der Hamiltonoperator (2.1), der für das eindimensionale transversale XY-Modells mit freien Randbedingungen in der Form

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \frac{1+\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y \right\} - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z \quad (3.1)$$

geschrieben werden kann. Den ersten Schritt zu seiner Diagonalisierung stellt die Einführung von Erzeugern \hat{a}_i^\dagger und Vernichtern \hat{a}_i gemäß

$$\hat{a}_i^\dagger := \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_i^x + i\hat{\sigma}_i^y) \quad , \quad \hat{a}_i := \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_i^x - i\hat{\sigma}_i^y) \quad (3.2)$$

dar. Mithilfe der Erzeuger und Vernichter können die Pauli-Spinoperatoren geschrieben werden als

$$\hat{\sigma}_i^x = \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i \quad , \quad (3.3a)$$

$$\hat{\sigma}_i^y = -i(\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i) \quad , \quad (3.3b)$$

$$\hat{\sigma}_i^z = 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1 \quad . \quad (3.3c)$$

Hieraus ergibt sich, dass der Hamiltonoperator (3.1) ausgedrückt in Termen der \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i eine quadratische Form der Gestalt

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \frac{1+\gamma}{2} (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i)(\hat{a}_{i+1}^\dagger + \hat{a}_{i+1}) - \frac{1-\gamma}{2} (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i)(\hat{a}_{i+1}^\dagger - \hat{a}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{h}{2} N \quad (3.4a)$$

$$= -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + \hat{a}_i \hat{a}_{i+1}^\dagger + \gamma (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1}^\dagger + \hat{a}_i \hat{a}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{h}{2} N \quad (3.4b)$$

ist. Aus den bekannten Kommutator- und Antikommutatorrelationen

$$[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta] = 2i\delta_{ij} \sum_{\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_i^\gamma \quad \text{und} \quad \{\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta\} = 2\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{mit} \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z \quad (3.5)$$

der Pauli-Spinoperatoren folgt, dass die Erzeuger und Vernichter für gleiche Positionen der Kette den Antikommutatorrelationen

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\} = 1 \quad \text{und} \quad (\hat{a}_i^\dagger)^2 = (\hat{a}_i)^2 = 0 \quad (3.6)$$

genügen und für unterschiedliche Positionen den Kommutatorrelationen

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad \text{für} \quad i \neq j. \quad (3.7)$$

Die über die Erzeuger und Vernichter definierten Teilchen verhalten sich somit für gleiche Positionen innerhalb der Kette wie Fermionen und für unterschiedliche Positionen wie Bosonen. Auf einem Gitterplatz kann sich somit insbesondere immer nur ein Teilchen befinden. Teilchen auf unterschiedlichen Gitterplätzen hingegen bemerken nichts von ihren Nachbarn. Es handelt sich bei den Teilchen somit um Hard-Core-Bosonen. Ausgedrückt über die Hard-Core-Bosonen weist der Wechselwirkungsterm des Hamiltonoperators Hopping-Terme und Erzeugungs- bzw. Vernichtungsterme auf. Hopping-Terme vermitteln das Springen eines Hard-Core-Bosons von einem Platz der Kette zu einem benachbarten Platz. Diese Terme sind unabhängig von der Anisotropie γ . Durch die Erzeugungs- und Vernichtungsterme werden Hard-Core-Bosonen auf benachbarten Gitterplätzen paarweise erzeugt bzw. vernichtet. Diese Terme hängen linear von der Anisotropie γ ab. Insbesondere verschwinden diese Terme im XX-Modell, für das $\gamma = 0$ ist. Im XX-Modell ist somit im Gegensatz zum Ising- und zum XY-Modell die Anzahl der Hard-Core-Bosonen erhalten. Dies erklärt auch, weshalb das XX-Modell einer anderen Universalitätsklasse angehört als das Ising- und das XY-Modell. Das transversale Feld liefert in der Darstellung über die Hard-Core-Bosonen einen konstanten Energiebeitrag, der von der Anzahl der Gitterplätze abhängt und zu dem ein von der Anzahl der Hard-Core-Bosonen abhängiger Anteil hinzukommt.

Bedingt durch die gemischten Kommutatorrelationen existiert keine kanonische, d. h. die Kommutatorrelationen erhaltende Transformation, die den Hamiltonoperator (3.4) diagonalisiert. Aus diesem Grund werden durch die *Jordan-Wigner-Transformation* [218]

$$\hat{c}_i^\dagger := \hat{a}_i^\dagger \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right\} \quad , \quad \hat{c}_i := \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right\} \hat{a}_i \quad (3.8)$$

die Operatoren \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i eingeführt. Sie erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0, \quad (3.9)$$

stellen also fermionische Erzeuger und Vernichter dar. Unter Ausnutzung von

$$\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (3.10)$$

lautet die inverse Transformation zu (3.8)

$$\hat{a}_i^\dagger = \hat{c}_i^\dagger \exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\} \quad , \quad \hat{a}_i = \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\} \hat{c}_i. \quad (3.11)$$

$\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j$ hat als fermionischer Teilchenzahloperator die Eigenwerte $+1$ und -1 . Die Jordan-Wigner-Transformation überführt somit die Hard-Core-Boseoperatoren durch Einfügen von Vorzeichen an entsprechenden Stellen in Fermioperatoren. Diese werden im Folgenden als c -Fermioperatoren bezeichnet. Aus den Eigenwerten von $\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j$ folgt unmittelbar

$$\exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\} = \exp \left\{ -i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\}. \quad (3.12)$$

Da die Teilchenzahloperatoren kommutieren, ist die folgende Faktorisierung möglich:

$$\exp \left\{ i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \right\} = \prod_{j=1}^{i-1} \exp \{ i\pi \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \} . \quad (3.13)$$

$\exp \{ i\pi \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \}$ wiederum kann durch Reihenentwicklung umgeschrieben werden zu

$$\exp \{ i\pi \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \} = 1 - 2\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j = (\hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j)(\hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j) = -\hat{\sigma}_j^z . \quad (3.14)$$

Die Pauli-Spinoperatoren lauten ausgedrückt über die c -Fermioperatoren

$$\hat{\sigma}_i^x = \left[\prod_{j=1}^{i-1} (\hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j)(\hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j) \right] (\hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i) , \quad (3.15a)$$

$$\hat{\sigma}_i^y = -i \left[\prod_{j=1}^{i-1} (\hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j)(\hat{c}_j^\dagger - \hat{c}_j) \right] (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i) , \quad (3.15b)$$

$$\hat{\sigma}_i^z = 2\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - 1 . \quad (3.15c)$$

Die inverse Jordan-Wigner-Transformation (3.11) überführt den Hamiltonoperator des eindimensionalen transversalen XY-Modells auf die Gestalt

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \frac{1+\gamma}{2} (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i)(\hat{c}_{i+1}^\dagger + \hat{c}_{i+1}) - \frac{1-\gamma}{2} (\hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i)(\hat{c}_{i+1}^\dagger - \hat{c}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \frac{h}{2} N \quad (3.16a)$$

$$= -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i \hat{c}_{i+1}^\dagger + \gamma (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger - \hat{c}_i \hat{c}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \frac{h}{2} N . \quad (3.16b)$$

Dieser Ausdruck stellt eine quadratische Form von Fermioperatoren dar. Trotz der Nichtlokalität der Jordan-Wigner-Transformation ist der Hamiltonoperator in Termen der c -Fermioperatoren lokal.

Das weitere Vorgehen zur Diagonalisierung des Hamiltonoperators unterscheidet sich nun in Abhängigkeit von den Randbedingungen des Systems. Für die in diesem Abschnitt besprochene Kette mit freien Randbedingungen wird ein Verfahren nach Lieb, Schultz und Mattis [191] angewendet, welches zur Diagonalisierung einer allgemeinen quadratischen Form von Fermioperatoren

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j} \left[\hat{c}_i^\dagger A_{ij} \hat{c}_j + \frac{1}{2} \left(\hat{c}_i^\dagger B_{ij} \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_i B_{ij} \hat{c}_j \right) \right] \quad (3.17)$$

mit reellwertigen Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} geeignet ist. Da $\hat{\mathcal{H}}$ hermitesch ist, muss \mathbf{A} symmetrisch sein. \mathbf{B} hingegen ist aufgrund der Antikommutatorrelationen zwischen den \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i antisymmetrisch.

Lieb, Schultz und Mattis haben gezeigt, dass die Transformation

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{k'}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \phi_{k'}(i) (\hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i) + \psi_{k'}(i) (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \left\{ (\phi_{k'}(i) + \psi_{k'}(i)) \hat{c}_i^\dagger + (\phi_{k'}(i) - \psi_{k'}(i)) \hat{c}_i \right\} , \end{aligned} \quad (3.18a)$$

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{k'} &= \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \phi_{k'}(i) (\hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i) - \psi_{k'}(i) (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \left\{ (\phi_{k'}(i) - \psi_{k'}(i)) \hat{c}_i^\dagger + (\phi_{k'}(i) + \psi_{k'}(i)) \hat{c}_i \right\} \end{aligned} \quad (3.18b)$$

kanonisch ist, d. h. es sich bei den $\hat{\eta}_{k'}^\dagger$ und $\hat{\eta}_{k'}$ um Fermioperatoren handelt, und die allgemeine quadratische Form (3.17) auf die Gestalt

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k'} \Lambda_{k'} \hat{\eta}_{k'}^\dagger \hat{\eta}_{k'} + \text{const} \quad (3.19)$$

Im Falle des XY-Modells ohne Transversalfeld sind die $\Lambda_{k'}$ symmetrisch bzgl. $k' \leftrightarrow \pi - k'$, sodass in [191] das erlaubte Intervall der k' -Werte von 0 bis $\pi/2$ angegeben und der Realteil von k'_0 zu $\pi/2$ bestimmt wurde.

Eine Abwandlung des Verfahrens von Lieb, Schultz und Mattis zur Diagonalisierung des Hamiltonoperators wurde von Iglóí und Turban in [217] für das eindimensionale transversale Ising-Modell mit freien Randbedingungen formuliert. Hier werde seine verallgemeinerte Form für das transversale XY-Modell mit freien Randbedingungen nach [216] kurz zusammengefasst.

Zwischen den Vektoren $\phi_{k'}$ und $\psi_{k'}$ besteht die Beziehung

$$\Lambda_{k'} \psi_{k'}(i) = -\frac{J}{2}(1-\gamma)\phi_{k'}(i-1) - h\phi_{k'}(i) - \frac{J}{2}(1+\gamma)\phi_{k'}(i+1), \quad (3.30a)$$

$$\Lambda_{k'} \phi_{k'}(i) = -\frac{J}{2}(1+\gamma)\psi_{k'}(i-1) - h\psi_{k'}(i) - \frac{J}{2}(1-\gamma)\psi_{k'}(i+1). \quad (3.30b)$$

i läuft dabei von 1 bis N und es gelte $\phi_{k'}(0) = \phi_{k'}(N+1) = 0$ sowie $\psi_{k'}(0) = \psi_{k'}(N+1) = 0$. Der $2N$ -dimensionale Vektor $\mathbf{V}_{k'}$ mit

$$V_{k'}(2i-1) = -\phi_{k'}(i), \quad (3.31a)$$

$$V_{k'}(2i) = \psi_{k'}(i) \quad (3.31b)$$

erlaubt es nun, (3.30a) und (3.30b) als Eigenwertproblem einer Matrix \mathbf{T} der Dimension $2N \times 2N$ mit

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & & & & & \\ h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & \ddots & & & \\ \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \\ & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 \\ & & & \ddots & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & h & \\ & & & & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & h & 0 & \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

darzustellen gemäß

$$\mathbf{T}\mathbf{V}_{k'} = \Lambda_{k'}\mathbf{V}_{k'}. \quad (3.33)$$

Durch die Diagonalisierung von \mathbf{T} , wofür wiederum die Routine *jacobi.cpp* aus den Numerical Recipes in C++ [219] verwendet wird, erhält man unmittelbar die Vektoren $\phi_{k'}$ und $\psi_{k'}$. Die Eigenwerte $\Lambda_{k'}$ erscheinen einmal mit positivem und einmal mit negativem Vorzeichen. Da die Energien der Moden nichtnegativ sein müssen, wird der negative Zweig vernachlässigt. Der Vorteil des Verfahrens von Iglóí und Turban gegenüber dem Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis besteht darin, dass das relative Vorzeichen der Vektoren $\phi_{k'}$ und $\psi_{k'}$ direkt bekannt ist, jedoch wird dies mit dem höheren Rechenaufwand zur Diagonalisierung einer Matrix der Dimensionalität $2N \times 2N$ gegenüber $N \times N$ erkauft.

3.1.2 Periodische Randbedingungen

Die Diagonalisierung des Hamiltonoperators des eindimensionalen transversalen XY-Modells mit periodischen Randbedingungen

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1+\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y \right\} - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z. \quad (3.34)$$

mit

$$\hat{\sigma}_{N+1}^\alpha = \hat{\sigma}_1^\alpha \quad \text{mit } \alpha = x, y, z \quad (3.35)$$

verläuft bis nach der Jordan-Wigner-Transformation analog zum Modell mit freien Randbedingungen. An dieser Stelle hat der Hamiltonoperator die Gestalt

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i \hat{c}_{i+1}^\dagger + \gamma (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger - \hat{c}_i \hat{c}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \frac{h}{2} N \\ & + \frac{J}{2} e^{i\pi\hat{N}} \left\{ \hat{c}_N^\dagger \hat{c}_1 - \hat{c}_N \hat{c}_1^\dagger + \gamma (\hat{c}_N^\dagger \hat{c}_1^\dagger - \hat{c}_N \hat{c}_1) \right\}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Unterschiede zum Modell mit freien Randbedingungen ergeben sich somit durch den Zusatzterm

$$\frac{J}{2} e^{i\pi\hat{N}} \left\{ \hat{c}_N^\dagger \hat{c}_1 - \hat{c}_N \hat{c}_1^\dagger + \gamma (\hat{c}_N^\dagger \hat{c}_1^\dagger - \hat{c}_N \hat{c}_1) \right\}. \quad (3.37)$$

Der Operator

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \quad (3.38)$$

zählt die Gesamtzahl der fermionischen Anregungen im System, deren Anzahl das Vorzeichen des Zusatzterms bestimmt. Es ist für das Modell mit periodischen Randbedingungen somit zwischen dem Sektor des Hamiltonoperators mit einer geraden Anzahl an Anregungen zu unterscheiden (gerader Sektor) und dem Sektor mit einer ungeraden Anzahl an Anregungen (ungerader Sektor). Wegen

$$\left[\hat{H}, e^{i\pi\hat{N}} \right] = 0 \quad (3.39)$$

können beide Operatoren jedoch gleichzeitig diagonalisiert werden. Dies ist zum einen durch die bereits für das Modell mit freien Randbedingungen beschriebenen Verfahren nach Lieb, Schultz und Mattis mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -h & -\frac{J}{2} & & & & & & & & \pm\frac{J}{2} \\ -\frac{J}{2} & -h & -\frac{J}{2} & & & & & & & \\ & -\frac{J}{2} & -h & -\frac{J}{2} & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & & -\frac{J}{2} & -h & -\frac{J}{2} & \\ & & & & & & -\frac{J}{2} & -h & -\frac{J}{2} & \\ \pm\frac{J}{2} & & & & & & -\frac{J}{2} & -h & & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{J}{2}\gamma & & & & & & & & \mp\frac{J}{2} \\ \frac{J}{2}\gamma & 0 & -\frac{J}{2}\gamma & & & & & & & \\ & \frac{J}{2}\gamma & 0 & -\frac{J}{2}\gamma & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & & \frac{J}{2}\gamma & 0 & -\frac{J}{2}\gamma & \\ & & & & & & \frac{J}{2}\gamma & 0 & -\frac{J}{2}\gamma & \\ \pm\frac{J}{2} & & & & & & \frac{J}{2}\gamma & 0 & -\frac{J}{2}\gamma & \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

bzw. nach Iglói und Turban mit

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & & 0 & \mp\frac{J}{2}(1+\gamma) \\ h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & 0 & 0 & \mp\frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 \\ 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & \ddots & \\ \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & \ddots & \ddots & \ddots & h & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & h & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 \\ 0 & \mp\frac{J}{2}(1-\gamma) & \ddots & 0 & 0 & \frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & h & \\ \mp\frac{J}{2}(1+\gamma) & 0 & & 0 & \frac{J}{2}(1-\gamma) & 0 & h & 0 & \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

möglich. Die oberen Vorzeichen beziehen sich hierbei auf den geraden Sektor des Hamiltonoperators, die unteren Vorzeichen auf den ungeraden Sektor. Diese Verfahren werden für numerische Berechnungen verwendet. Der Hamiltonoperator des Systems mit periodischen Randbedingungen kann jedoch auch analytisch diagonalisiert werden ohne Notwendigkeit der Diagonalisierung von Matrizen. Dieses Verfahren wird sich im weiteren Verlauf der Arbeit bei der Beschreibung des Relaxationsprozesses des Systems nach einem Quench im Rahmen der semiklassischen Theorie als nützlich erweisen wird und soll an dieser Stelle

beschrieben werden. Seine Grundidee geht auf Arbeiten von Barouch und McCoy zurück [63–66]. Das hier gezeigte Vorgehen stellt eine Verallgemeinerung des Verfahrens von Rossini *et al.* in [41] für das transversale Ising-Modell auf das transversale XY-Modell dar.

Es werde zunächst der Sektor mit einer geraden Anzahl an Fermionen betrachtet. In diesem ist $e^{i\pi\hat{N}} = 1$ und der Hamiltonoperator kann geschrieben werden in der Form

$$\hat{H}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1+\gamma}{2} (\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i) (\hat{c}_{i+1}^\dagger + \hat{c}_{i+1}) - \frac{1-\gamma}{2} (\hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i) (\hat{c}_{i+1}^\dagger - \hat{c}_{i+1}) \right\} - h \sum_{i=1}^N \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \frac{h}{2} N \quad (3.42)$$

mit antiperiodischen Randbedingungen $\hat{c}_{N+1} = -\hat{c}_1$ für die c -Fermioperatoren. Statt der direkten Diagonalisierung des Hamiltonoperators wie in den Verfahren nach Lieb, Schultz und Mattis bzw. Iglói und Turban wird die Diagonalisierung in zwei Teilschritte unterteilt. Bei diesen handelt es sich um eine Fourier-Transformation und eine anschließende Bogoliubov-Rotation.

Die Fourier-Transformation

$$\hat{c}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \hat{c}_{k'}^\dagger e^{-ik'i} \quad , \quad \hat{c}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \hat{c}_{k'} e^{ik'i} \quad . \quad (3.43)$$

mit

$$k' = \frac{2\pi(n + \frac{1}{2})}{N} \quad , \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 \quad (3.44)$$

überführt den Hamiltonoperator (3.42) auf die Gestalt

$$\hat{H}^+ = - \sum_{k'>0} iJ\gamma \sin(k') (\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{-k'}^\dagger + \hat{c}_{k'} \hat{c}_{-k'}) - \sum_{k'>0} (J \cos(k') + h) (\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'} + \hat{c}_{-k'}^\dagger \hat{c}_{-k'}) + \frac{h}{2} N \quad . \quad (3.45)$$

Unter Verwendung von

$$\bar{c}_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{c}_{k'}^\dagger & \hat{c}_{-k'} \end{pmatrix} \quad , \quad H_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{k'} & -ib_{k'} \\ ib_{k'} & -a_{k'} \end{pmatrix} \quad , \quad \bar{c}_{k'} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{k'} \\ \hat{c}_{-k'}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

mit

$$a_{k'} = -(J \cos(k') + h) \quad , \quad (3.47a)$$

$$b_{k'} = J\gamma \sin(k') \quad . \quad (3.47b)$$

kann \hat{H}^+ geschrieben werden als

$$\hat{H}^+ = \sum_{k'>0} \bar{c}_{k'}^\dagger H_{k'}^\dagger \bar{c}_{k'} = \sum_{k'>0} \left\{ a_{k'} (\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'} + \hat{c}_{-k'}^\dagger \hat{c}_{-k'}) - ib_{k'} (\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{-k'}^\dagger + \hat{c}_{k'} \hat{c}_{-k'}) \right\} - \sum_{k'>0} a_{k'} \quad (3.48)$$

Offensichtlich gilt $a_{-k'} = a_{k'}$ und $b_{-k'} = -b_{k'}$.

Der Hamiltonoperator soll nun durch die Bogoliubov-Rotation

$$\bar{\eta}_{k'} = R_{k'} \bar{c}_{k'} \quad (3.49)$$

mit

$$\bar{\eta}_{k'} = \begin{pmatrix} \hat{\eta}_{k'} \\ \hat{\eta}_{-k'}^\dagger \end{pmatrix} \quad , \quad R_{k'} = \begin{pmatrix} u_{k'}^* & v_{k'}^* \\ -v_{k'} & u_{k'} \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

diagonalisiert werden. Ausgeschrieben lautet diese Transformation

$$\hat{\eta}_{k'}^\dagger = u_{-k'} \hat{c}_{k'}^\dagger - v_{-k'} \hat{c}_{-k'} \quad , \quad (3.51a)$$

$$\hat{\eta}_{k'} = u_{k'}^* \hat{c}_{k'} + v_{k'}^* \hat{c}_{-k'}^\dagger \quad . \quad (3.51b)$$

$R_{k'}$ ist unitär, d. h.

$$R_{k'}^{-1} = R_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} u_{k'} & -v_{k'}^* \\ v_{k'} & u_{k'}^* \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Hieraus ergibt sich für die inverse Bogoliubov-Rotation

$$\hat{c}_{k'}^\dagger = u_{-k'}^* \hat{\eta}_{k'}^\dagger + v_{-k'} \hat{\eta}_{-k'}, \quad (3.53a)$$

$$\hat{c}_{k'} = u_{k'} \hat{\eta}_{k'} - v_{k'}^* \hat{\eta}_{-k'}^\dagger \quad (3.53b)$$

und aus $R_{k'} R_{k'}^\dagger = 1$ folgt $|u_{k'}|^2 + |v_{k'}|^2 = 1$. $R_{k'} H_{k'} R_{k'}^\dagger$ soll Diagonalgestalt haben mit den Einträgen $\Lambda_{k'}$ und $-\Lambda_{k'}$ auf der Diagonale. Hieraus ergeben sich die folgenden Bedingungen:

$$\left(|u_{k'}|^2 - |v_{k'}|^2\right) a_{k'} + (u_{k'} v_{k'}^* - u_{k'}^* v_{k'}) i b_{k'} = \Lambda_{k'}, \quad (3.54a)$$

$$-2u_{k'} v_{k'} a_{k'} + (u_{k'}^2 + v_{k'}^2) i b_{k'} = 0. \quad (3.54b)$$

Diese werden erfüllt durch

$$u_{k'} = \frac{\Lambda_{k'} + a_{k'}}{\sqrt{2\Lambda_{k'}(\Lambda_{k'} + a_{k'})}}, \quad (3.55a)$$

$$v_{k'} = \frac{i b_{k'}}{\sqrt{2\Lambda_{k'}(\Lambda_{k'} + a_{k'})}}, \quad (3.55b)$$

$$\Lambda_{k'} = \sqrt{a_{k'}^2 + b_{k'}^2}. \quad (3.55c)$$

Mit den Symmetrien von $a_{k'}$ und $b_{k'}$ folgt $u_{-k'} = u_{k'}$, $v_{-k'} = -v_{k'}$ und $\Lambda_{-k'} = \Lambda_{k'}$. Weiterhin ist $u_{k'}^* = u_{k'}$ und $v_{k'}^* = -v_{k'}$. Die diagonalisierte Form des Hamiltonoperators hat wiederum die Gestalt

$$\hat{H}^+ = \sum_{k'} \Lambda_{k'} \left(\hat{\eta}_{k'}^\dagger \hat{\eta}_{k'} - \frac{1}{2} \right) \quad (3.56)$$

mit den Energien der Eigenmoden

$$\Lambda_{k'} = \sqrt{\hbar^2 + J^2 \gamma^2 + 2Jh \cos(k') + J^2(1 - \gamma^2) \cos^2(k')}. \quad (3.57)$$

Es unterscheiden sich somit lediglich die erlaubten Werte der Wellenzahlen von dem Modell mit freien Randbedingungen. Die Bogoliubov-Rotation kann auch unter Verwendung des Bogoliubov-Winkels $\theta_{k'}$ geschrieben werden. Hierzu wird

$$u_{k'} = \cos\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right), \quad (3.58a)$$

$$v_{k'} = i \sin\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \quad (3.58b)$$

gesetzt. Mit den Werten (3.55a) und (3.55b) für $u_{k'}$ und $v_{k'}$ folgt unmittelbar

$$\tan(\theta_{k'}) = \frac{b_{k'}}{a_{k'}} = -\frac{J\gamma \sin(k')}{J \cos(k') + h}. \quad (3.59)$$

Ausgedrückt über den Bogoliubov-Winkel gilt somit

$$\hat{\eta}_{k'}^\dagger = \cos\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{c}_{k'}^\dagger + i \sin\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{c}_{-k'}, \quad (3.60a)$$

$$\hat{\eta}_{k'} = \cos\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{c}_{k'} - i \sin\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{c}_{-k'}^\dagger \quad (3.60b)$$

bzw. für die inverse Transformation

$$\hat{c}_{k'}^\dagger = \cos\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{\eta}_{k'}^\dagger - i \sin\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{\eta}_{-k'}, \quad (3.61a)$$

$$\hat{c}_{k'} = \cos\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{\eta}_{k'} + i \sin\left(\frac{\theta_{k'}}{2}\right) \hat{\eta}_{-k'}^\dagger. \quad (3.61b)$$

Analoge Überlegungen sind auch im Sektor ungerader c -Fermionenzahl möglich. Hierbei ergeben sich periodische Randbedingungen $\hat{c}_{N+1} = \hat{c}_1$ für die c -Fermioperatoren. Das weitere Vorgehen verläuft analog zum Sektor mit gerader c -Fermionenzahl und führt zu der geringfügig abweichenden Diagonalgestalt des Hamiltonoperators

$$\hat{H}^- = \sum_{k' \neq 0} \Lambda_k \left(\hat{\eta}_{k'}^\dagger \hat{\eta}_{k'} - \frac{1}{2} \right) - (J + h) \left(\hat{\eta}_0^\dagger \hat{\eta}_0 - \frac{1}{2} \right) \quad (3.62)$$

mit den erlaubten Wellenzahlen

$$k' = \frac{2\pi n}{N}, \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 \quad (3.63)$$

Für Details sei auf [47, 48] verwiesen.

Bemerkungen

Im Folgenden wird die Wellenzahl k' durch $k = \pi - k'$ für $k' > 0$ bzw. $k = -\pi - k'$ für $k' < 0$ ersetzt und alle auftretenden Größen werden in Abhängigkeit von k angegeben, um den Ausdruck für die Energien der Moden auf die in der Literatur übliche Form zu bringen. Hierdurch ergibt sich $\cos(k') = -\cos(k)$ und $\sin(k') = \sin(k)$. Diese Ersetzung geht auf die Betrachtungen von Pfeuty für das transversale Ising-Modell in [192] zurück und dient dem Zweck, dass die Energie der Moden mit der Wellenzahl anwächst.

3.1.3 Spektrum des Hamiltonoperators

Bevor sich der Zeitentwicklung des Systems nach dem Quench zugewandt wird, soll an dieser Stelle noch auf das Spektrum des Hamiltonoperators eingegangen werden. Hierzu werden zunächst die zentralen Resultate der Diagonalisierung des Hamiltonoperators in den vorangegangenen Abschnitten kurz zusammengefasst und über k ausgedrückt. In diesen wurde gezeigt, dass sowohl der Hamiltonoperator des eindimensionalen transversalen XY-Modells mit freien als auch der des Modells mit periodischen Randbedingungen durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen auf die Diagonalgestalt

$$\hat{H} = \sum_k \Lambda_k \left(\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k - \frac{1}{2} \right) \quad (3.64)$$

gebracht werden kann mit den Energien

$$\Lambda_k = \sqrt{h^2 + J^2\gamma^2 - 2Jh \cos(k) + J^2(1 - \gamma^2) \cos^2(k)} = \sqrt{J^2\gamma^2 \sin^2(k) + (J \cos(k) - h)^2} \quad (3.65)$$

der Moden. Für das System mit periodischen Randbedingungen ist hierbei zwischen dem Sektor des Hamiltonoperators mit gerader und dem Sektor mit ungerader Anzahl an c -Fermionen zu unterscheiden. Da der Grundzustand im geraden Sektor liegt, wird sich im Rahmen der vorliegenden Dissertation auf diesen beschränkt. Die erlaubten Werte von k liegen für das Modell mit periodischen Randbedingungen äquidistant im Intervall $[-\pi, \pi]$:

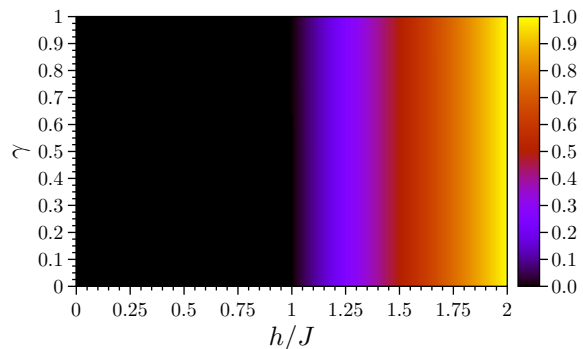
$$k = \frac{2\pi(n + \frac{1}{2})}{N}, \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (3.66)$$

Für das Modell mit freien Randbedingungen existieren in der paramagnetischen Phase ($h/J > 1$) N reellwertige Wellenzahlen k mit

$$k = \frac{\pi n}{N}, \quad n = 0, \dots, N - 1 \quad (3.67)$$

mit Abweichungen von der Ordnung $\mathcal{O}(1/N^2)$. In der ferromagnetischen Phase ($h/J < 1$) wird die Wellenzahl $k = 0$ komplexwertig. Sie wird mit $k_0 = \nu$ bezeichnet und hat verschwindenden Realteil. Die Energie Λ_{k_0} der zugehörigen Mode strebt mit der Systemgröße asymptotisch gegen null, sodass im thermodynamischen Limes in der ferromagnetischen Phase der Grundzustand und der erste angeregte Zustand energetisch entartet sind und das System keine Energielücke aufweist (gapless). In der paramagnetischen Phase hingegen wächst die Energie der energetisch niedrigsten Mode wie in Abbildung 3.1 dargestellt

Abbildung 3.1: Numerisch bestimmte Energie der energetisch niedrigsten Mode des eindimensionalen transversalen XY-Modells mit freien Randbedingungen in Einheiten von J in Abhängigkeit von h/J und γ . Die Resultate wurden für die Spinkette der Länge $L = 256$ bestimmt. Die Energie der Mode ist im Rahmen der numerischen Genauigkeit unabhängig von γ . In der ferromagnetischen Phase ($h/J < 1$) gehört die korrespondierende Mode zur komplexwertigen Wellenzahl k_0 und ihre Energie verschwindet asymptotisch, während sie in der paramagnetischen Phase ($h/J > 1$) zu $k = 0$ gehört und ihre Energie linear mit h anwächst.



unabhängig von der Anisotropie γ linear mit dem transversalen Feld h an, wodurch eine Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand entsteht. Das System wird in der paramagnetischen Phase daher als gapped bezeichnet. Im Falle periodischer Randbedingungen sind in der ferromagnetischen Phase der Grundzustand des geraden und des ungeraden Sektors der c -Fermionen im thermodynamischen Limes energetisch entartet, sodass das Modell mit periodischen Randbedingungen in der ferromagnetischen Phase ebenfalls keine Energielücke aufweist. Diese entsteht in der paramagnetischen Phase durch Aufhebung der energetischen Entartung der beiden Grundzustände.

Es werde nun der Einfluss der Parameter des Hamiltonoperators auf die Energien seiner Moden für die reellwertigen Wellenzahlen k untersucht. Eine Betrachtung von Gleichung (3.65) zeigt, dass sich für gegebenes k der Wert von Λ_k in führender Ordnung linear sowohl mit der Kopplungskonstante J , der Anisotropie γ als auch dem transversalen Feld h ändert. Die partiellen Ableitungen von Λ_k nach den Parametern des Hamiltonoperators lauten

$$\frac{\partial \Lambda_k}{\partial J} = \frac{J(\gamma^2 - h \cos(k)) + (1 - \gamma^2) \cos^2(k)}{\Lambda_k}, \quad (3.68a)$$

$$\frac{\partial \Lambda_k}{\partial \gamma} = \frac{J^2 \gamma \sin^2(k)}{\Lambda_k}, \quad (3.68b)$$

$$\frac{\partial \Lambda_k}{\partial h} = \frac{h - 2J \cos(k)}{\Lambda_k}. \quad (3.68c)$$

Für gegebene Parameter J , γ und h des Hamiltonoperators werde nun der Verlauf der Λ_k als Funktion der Wellenzahl k untersucht. An den Rändern des Intervalls von 0 bis π gilt für Λ_k

$$\Lambda_0 = |h - J| \quad (3.69)$$

bzw.

$$\Lambda_\pi = h + J. \quad (3.70)$$

Zur Untersuchung des Verlaufs der Λ_k im Innern von $[0, \pi]$ wird die partielle Ableitung von Λ_k nach k betrachtet:

$$\frac{\partial \Lambda_k}{\partial k} = \frac{J \sin(k)(h - J(1 - \gamma^2) \cos(k))}{\Lambda_k}. \quad (3.71)$$

Nullstellen der Ableitung liegen zum einen an den Intervallgrenzen. Im Innern von $[0, \pi]$ tritt für $h < J(1 - \gamma^2)$ an der Stelle

$$k_{\min} = \arccos\left(\frac{h}{J(1 - \gamma^2)}\right) \quad (3.72)$$

eine Nullstelle der Ableitung auf, die zu einem Minimum der Λ_k gehört mit dem Wert

$$\Lambda_{k_{\min}} = \sqrt{h^2 + J^2 \gamma^2 - \frac{h^2}{1 - \gamma^2}}. \quad (3.73)$$

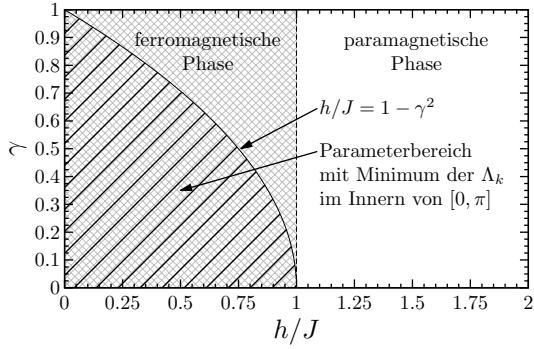


Abbildung 3.2: Phasendiagramm des eindimensionalen transversalen XY-Modells bei $T = 0$ in Abhängigkeit von h/J und γ . Für $h/J < 1$ befindet sich das System in der ferromagnetischen Phase, für $h > J$ in der paramagnetischen Phase. Die schraffierte Fläche innerhalb der ferromagnetischen Phase kennzeichnet den Bereich der Parameter des Hamiltonoperators, innerhalb dessen ein Minimum der Energien Λ_k im Innern des Intervalls $[0, \pi]$ auftritt. Dieser wird durch $h/J = 1 - \gamma^2$ begrenzt.

Der Bereich der Parameter des Hamiltonoperators, für den die Bestimmungsgleichung (3.72) erfüllt werden kann, ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Im Falle des Auftretens des Minimums ist $\Lambda_{k_{\min}}$ nicht nur ein lokales Minimum der Λ_k für die reellwertigen k , sondern ihr globale Minimum auf dem Intervall $[0, \pi]$. Kann (3.72) aufgrund der Parameter des Hamiltonoperators nicht erfüllt werden, so wird das Minimum der Λ_k zu reellwertiger Wellenzahl für $k = 0$ angenommen und hat den Wert $|h - J|$. Die Energien der Moden sind dann streng monoton wachsend mit k . Dies ist für $h/J > 1 - \gamma^2$, also insbesondere in der paramagnetischen Phase der Fall. Dass sich das System in der ferromagnetischen Phase befindet, stellt eine notwendige, jedoch keine hinreichende Bedingung für die Erfüllbarkeit der Bestimmungsgleichung (3.72) dar. Für das transversale Ising-Modell ($\gamma = 1$) kann (3.72) nicht erfüllt werden, sodass für dieses wie durch Pfeuty in [192] gezeigt die Energie der Moden linear mit der Wellenzahl k wächst. k_{\min} liegt im Intervall $[0, \pi/2]$. Mit kleiner werdendem Transversalfeld h verschiebt es sich immer weiter zu $\pi/2$ und nimmt für $h = 0$ den Wert $\pi/2$ an. Der Verlauf der Λ_k ist dann symmetrisch bzgl. $\pi/2$, sodass das Intervall der erlaubten Werte der Wellenzahlen k bei verschwindendem Transversalfeld wie in [191] auf 0 bis $\pi/2$ begrenzt werden kann. $\Lambda_{k_{\min}}$ nimmt mit der Anisotropie γ ab und erreicht für das XX-Modell ($\gamma = 0$) den Wert 0. Das Auftreten des Minimums von Λ_k im Innern von $[0, \pi]$ führt dazu, dass die Energien der Moden entartet sind auf dem Intervall

$$\left[0, \arccos \left(\frac{2h}{J(1 - \gamma^2)} - 1 \right) \right]. \quad (3.74)$$

Der Einfluss der Anisotropie γ und des transversalen Feldes h auf den Verlauf der Λ_k sowie die Position und den Wert des Minimums sind in Abbildung 3.3 veranschaulicht. Aus der Abbildung wird auch ersichtlich, wie sich die Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand für das System mit freien Randbedingungen am Phasenübergang $h/J = 1$ schließt.

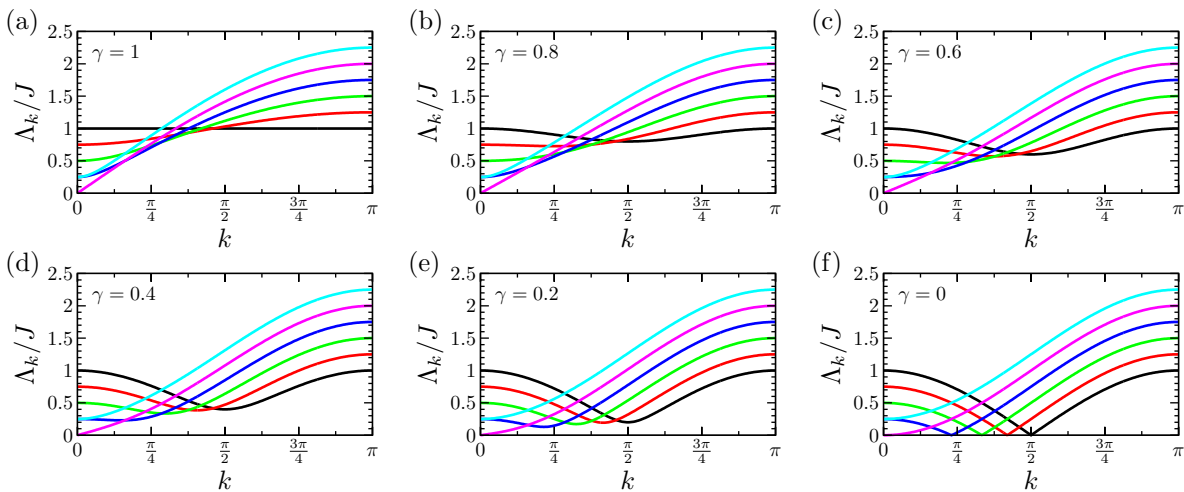


Abbildung 3.3: (a) - (f) Verlauf von Λ_k/J für die reellwertigen Wellenzahlen k im eindimensionalen transversalen XY-Modell für verschiedene Werte der Anisotropie γ und verschiedene Verhältnisse von h/J . Der Farbcode lautet – $h/J = 0$, – $h/J = 0.25$, – $h/J = 0.5$, – $h/J = 0.75$, – $h/J = 1$, – $h/J = 1.25$.

3.2 Observablen

Wie bereits im einführenden Kapitel zum Quenchprotokoll und der Nichtgleichgewichtsdynamik beschrieben, entwickelt sich der Zustand des Systems nach dem Quench unter dem finalen Hamiltonoperator \hat{H} gemäß der Schrödingergleichung

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi(t=0)\rangle . \quad (3.75)$$

Hierbei wurde wie auch im Folgenden $t_0 = 0$ gesetzt. Vor dem Quench sei das System im Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 präpariert, d. h.

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi_0^{(0)}\rangle . \quad (3.76)$$

Zur Charakterisierung des Relaxationsprozesses nach dem Quench werden verschiedene Observablen betrachtet. Bei diesen handelt es sich um die *Autokorrelationsfunktion*, die *gleichzeitige Korrelationsfunktion*, die *lokale Magnetisierung* und die *Verschränkungsentropie*. Sie werden im Folgenden definiert und ihre physikalische Bedeutung erläutert. In den anschließenden Kapiteln werden ein exaktes Verfahren zur Berechnung ihrer Zeitentwicklung sowie eine semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses vorgestellt.

Die allgemeine Form einer Korrelationsfunktion zwischen zwei Spins an beliebigen Positionen r_1 und r_2 der Kette betrachtet zu den Zeiten t_1 und t_2 lautet

$$C^{xx}(r_1, t_1; r_2, t_2) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_{r_1}^x(t_1) \hat{\sigma}_{r_2}^x(t_2) | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.77)$$

Im Rahmen der vorliegenden Dissertation werden zwei Spezialfälle dieser allgemeinen Korrelationsfunktion betrachtet. Bei diesen handelt es sich zum einen um die *Autokorrelationsfunktion*

$$C_{\text{auto}}^{xx}(r, t) := C^{xx}(r, t; r, 0) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_r^x(t) \hat{\sigma}_r^x(0) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \langle \Psi_0^{(0)} | e^{i\hat{H}t} \hat{\sigma}_r^x e^{-i\hat{H}t} \hat{\sigma}_r^x | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.78)$$

Die Autokorrelationsfunktion betrachtet eine einzelne Position der Kette und untersucht die Korrelation des Spins zu einem Zeitpunkt t nach dem Quench mit sich selbst zum Zeitpunkt 0. Im Falle periodischer Randbedingungen ist die Autokorrelationsfunktion von der Position des betrachteten Spins innerhalb der Kette unabhängig, sodass auf die explizite Angabe der betrachteten Position in der Kette verzichtet werden kann, jedoch ist hier zu beachten, dass der Operator $\hat{\sigma}_r^x(t) \hat{\sigma}_r^x(0)$ Zustände aus dem geraden und dem ungeraden Sektor des Hamiltonoperators koppelt. Dies zeigt sich in der Darstellung der Zeitentwicklung der Autokorrelationsfunktion in der Eigenbasis des Hamiltonoperators nach dem Quench

$$C_{\text{auto}}^{xx}(r, t) = \sum_{\lambda, \lambda', \lambda''} c_{\lambda,0}^* c_{\lambda'',0} e^{i(E_\lambda - E_{\lambda'})t} \langle \Psi_\lambda | \hat{\sigma}_r^x | \Psi_{\lambda'} \rangle \langle \Psi_{\lambda'} | \hat{\sigma}_r^x | \Psi_{\lambda''} \rangle \quad (3.79)$$

unter Berücksichtigung der Gestalt von $\hat{\sigma}_r^x$ ausgedrückt über die c -Fermioperatoren gemäß (3.15a). Aus diesem Grund wird die Autokorrelationsfunktion im Falle periodischer Randbedingungen wie in [39,41,66] beschrieben über den Vier-Spin-Korrelator

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_{1+\frac{N}{2}}^x(t) \hat{\sigma}_{1-r+N}^x(t) \hat{\sigma}_1^x(0) \hat{\sigma}_{1-r+\frac{N}{2}}^x(0) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_{1-r+N}^x(t) \hat{\sigma}_1^x(0) \hat{\sigma}_{1+\frac{N}{2}}^x(t) \hat{\sigma}_{1-r+\frac{N}{2}}^x(0) | \Psi_0^{(0)} \rangle \quad (3.80)$$

bestimmt, der im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ dem Quadrat der Autokorrelationsfunktion entspricht.

In der ferromagnetischen Phase zeigt die Autokorrelationsfunktion einen exponentiellen Abfall mit der Zeit [216], der durch die Relaxationszeit τ bestimmt wird

$$C_{\text{auto}}^{xx}(r, t) \propto e^{-t/\tau} . \quad (3.81)$$

In der paramagnetischen Phase kommt ein Vorfaktor $1/\sqrt{t}$ hinzu [216]. Im thermodynamischen Limes setzt sich der Abfall der Autokorrelationsfunktion bis $t \rightarrow \infty$ fort, wohingegen im Falle endlicher Systemgröße nach einer von der Systemgröße und den Quenchparametern abhängigen Zeit ein quasiperiodisches Verhalten des Systems einsetzt. Für dieses Verhalten wird im Rahmen der semiklassischen Theorie eine anschauliche Erklärung mithilfe sich ballistisch ohne Wechselwirkung durch das System bewegender Quasiteilchen gegeben werden. Zudem wird ein Ausdruck für die Relaxationszeit hergeleitet werden.

Zum anderen wird die *gleichzeitige Korrelationsfunktion* zweier Spins betrachtet, die gegeben ist durch

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_{r_1}^x(t) \hat{\sigma}_{r_2}^x(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \langle \Psi_0^{(0)} | e^{i\hat{H}t} \hat{\sigma}_{r_1}^x \hat{\sigma}_{r_2}^x e^{-i\hat{H}t} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.82)$$

Sie untersucht die Korrelation zweier unterschiedlicher Spins der Kette an den Positionen r_1 und r_2 zum selben Zeitpunkt t nach dem Quench. Im Gegensatz zur Autokorrelationsfunktion kann sie auch für periodische Randbedingungen unmittelbar bestimmt werden, da, wie der Darstellung

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) = \sum_{\lambda, \lambda'} c_{\lambda, 0}^* c_{\lambda', 0} e^{i(E_\lambda - E_{\lambda'})t} \langle \Psi_\lambda | \hat{\sigma}_{r_1}^x \hat{\sigma}_{r_2}^x | \Psi_{\lambda'} \rangle \quad (3.83)$$

der Zeitentwicklung in der Eigenbasis des Hamiltonoperators nach dem Quench zu entnehmen ist, nur Zustände des Hamiltonoperators aus dem gleichen Sektor gekoppelt werden. Im Falle periodischer Randbedingungen hängt die gleichzeitige Korrelationsfunktion nur vom Abstand der beiden betrachteten Spins ab, sodass die Notation vereinfacht wird zu $C^{xx}(r, t) := C^{xx}(r_1, t; r_2, t)$ für $r = |r_1 - r_2|$. Betrachtet zu einem festen Zeitpunkt als Funktion des Abstandes r der beiden Spins zeigt die gleichzeitige Korrelationsfunktion für kleine Abstände einen exponentiellen Abfall, der durch die Korrelationslänge ξ bestimmt wird:

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) \propto e^{-r/\xi}. \quad (3.84)$$

Im thermodynamischen Limes wächst der Bereich des exponentiellen Abfalls der gleichzeitigen Korrelationsfunktion stetig mit der Zeit an. In endlichen Systemen kann wie bereits für die Autokorrelationsfunktion beschrieben ein quasiperiodisches Verhalten mit der Zeit beobachtet werden. Eine anschauliche Erklärung hierfür sowie die Herleitung eines Ausdrucks für ξ erfolgt ebenfalls im Rahmen der semiklassischen Theorie.

Die *lokale Magnetisierung*, die auch als lokaler Ordnungsparameter bezeichnet wird, wurde bereits in dem einleitenden Kapitel zum transversalen XY-Modell als ein möglicher Ordnungsparameter für das System endlicher Größe eingeführt. Unter Zeitentwicklung nach dem Quench lautet sie

$$m_\ell^x(t) = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\sigma}_\ell^x(t) | \Psi_1^{(0)} \rangle = \langle \Psi_0^{(0)} | e^{i\hat{H}t} \hat{\sigma}_\ell^x e^{-i\hat{H}t} | \Psi_1^{(0)} \rangle. \quad (3.85)$$

Für große Abstände zwischen den betrachteten Spins der Kette kann die gleichzeitige Korrelationsfunktion als Produkt der lokalen Magnetisierungen der beiden betrachteten Spins ausgedrückt werden:

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) \approx m_{r_1}^x(t) m_{r_2}^x(t). \quad (3.86)$$

Im Falle periodischer Randbedingungen ist die lokale Magnetisierung wie die Autokorrelationsfunktion von der Position des betrachteten Spins innerhalb der Kette unabhängig. Es ergibt sich somit

$$C^{xx}(r, t) \approx (m^x(t))^2. \quad (3.87)$$

Weiterhin werden auch hier Zustände des geraden und des ungeraden Sektors des Hamiltonoperators gekoppelt, sodass eine unmittelbare Berechnung der lokalen Magnetisierung im Falle periodischer Randbedingungen nicht möglich ist. Stattdessen kann sie gemäß obiger Gleichung für große Abstände r der betrachteten Spins als Wurzel der gleichzeitigen Korrelationsfunktion bestimmt werden. Aus der lokalen Magnetisierung können sowohl die Relaxationszeit als auch die Korrelationslänge des Systems bestimmt werden. Dies wird im entsprechenden Abschnitt zur semiklassischen Beschreibung des Relaxationsprozesses erläutert werden.

Die in [220] durch Bennett *et al.* eingeführte *Verschränkungsentropie* (Entanglement Entropy)

$$S_\ell(t) = -\text{Sp}\{\hat{\rho}_\ell(t) \ln(\hat{\rho}_\ell(t))\} \quad (3.88)$$

zweier Subsysteme des Systems stellt ein Maß für die Verschränkung eines zusammenhängenden Abschnitts von ℓ Spins der Kette (Subsystem A) mit den restlichen Spins des Systems (Subsystem B) dar. $\hat{\rho}_\ell(t)$ bezeichnet hierbei die reduzierte Dichtematrix des betrachteten Abschnitts der Länge ℓ der Kette zum Zeitpunkt t nach dem Quench. Während die Zeitentwicklung der Autokorrelationsfunktion, der gleichzeitigen Korrelationsfunktion und der lokalen Magnetisierung durch die Zeitentwicklung der Pauli-Spinoperatoren $\hat{\sigma}_i^x$ unmittelbar gegeben ist, erfordert die Berechnung der Verschränkungsentropie ein anderes Vorgehen, welches am Ende des folgenden Abschnitts erläutert wird. Dieses kann sowohl auf das System mit freien als auch auf das System mit periodischen Randbedingungen angewendet werden.

3.3 Exakte Beschreibung des Relaxationsprozesses: Freie-Fermionen-Technik

Die Berechnung der Zeitentwicklung des Systems erfolgt im Heisenbergbild. Die Zustände sind somit zeitunabhängig und die Zeitentwicklung eines Operators \hat{O} ist gegeben durch

$$\hat{O}(t) = e^{\imath\hat{H}t}\hat{O}e^{-\imath\hat{H}t}. \quad (3.89)$$

Bei der Bestimmung der Zeitentwicklung der Observablen sind vor allem die Pauli-Spinoperatoren $\hat{\sigma}_i^x$ von Bedeutung. Den Ausgangspunkt zur Bestimmung ihrer Zeitentwicklung bildet die Zeitentwicklung der Operatoren $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$, die sich aufgrund der Diagonalgestalt des die Relaxation des Systems nach dem Quench bestimmenden Hamiltonoperators \hat{H} in dieser Darstellung unmittelbar ergibt zu

$$\hat{\eta}_k^\dagger(t) = e^{\imath\Lambda_k t}\hat{\eta}_k^\dagger, \quad (3.90a)$$

$$\hat{\eta}_k(t) = e^{-\imath\Lambda_k t}\hat{\eta}_k. \quad (3.90b)$$

Die Zeitentwicklung der Fermioperatoren \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i nach der Jordan-Wigner-Transformation kann geschrieben werden in der Form

$$\hat{c}_i^\dagger(t) = \sum_{j=1}^N \left(f_{i,j}^*(t)\hat{c}_j^\dagger + g_{i,j}^*(t)\hat{c}_j \right), \quad (3.91a)$$

$$\hat{c}_i(t) = \sum_{j=1}^N \left(f_{i,j}(t)\hat{c}_j + g_{i,j}(t)\hat{c}_j^\dagger \right). \quad (3.91b)$$

Die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten $f_{i,j}(t)$ und $g_{i,j}(t)$ ergeben sich aus (3.22) mit (3.90a) und (3.90b) zu

$$f_{i,j}(t) = \frac{1}{4} \sum_k \left[e^{-\imath\Lambda_k t} (\phi_k(i) + \psi_k(i)) (\phi_k(j) + \psi_k(j)) + e^{\imath\Lambda_k t} (\phi_k(i) - \psi_k(i)) (\phi_k(j) - \psi_k(j)) \right], \quad (3.92a)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_k \left[\cos(\Lambda_k t) (\phi_k(i)\phi_k(j) + \psi_k(i)\psi_k(j)) - \imath \sin(\Lambda_k t) (\phi_k(i)\psi_k(j) + \psi_k(i)\phi_k(j)) \right],$$

$$g_{i,j}(t) = \frac{1}{4} \sum_k \left[e^{-\imath\Lambda_k t} (\phi_k(i) + \psi_k(i)) (\phi_k(j) - \psi_k(j)) + e^{\imath\Lambda_k t} (\phi_k(i) - \psi_k(i)) (\phi_k(j) + \psi_k(j)) \right], \quad (3.92b)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_k \left[\cos(\Lambda_k t) (\phi_k(i)\phi_k(j) - \psi_k(i)\psi_k(j)) + \imath \sin(\Lambda_k t) (\phi_k(i)\psi_k(j) - \psi_k(i)\phi_k(j)) \right].$$

Im Falle periodischer Randbedingungen können sie auch mithilfe des Bogoliubov-Winkels ausgedrückt werden in der Form

$$f_{i,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_k \left(\cos(\Lambda_k t) + \imath \cos(\theta_k) \sin(\Lambda_k t) \right) e^{\imath k(j-i)}, \quad (3.93a)$$

$$g_{i,j}(t) = -\frac{1}{N} \sum_k \sin(\theta_k) \sin(\Lambda_k t) e^{\imath k(j-i)}. \quad (3.93b)$$

Im Rahmen der numerischen Berechnungen wird die Darstellung der $f_{i,j}(t)$ und $g_{i,j}(t)$ über die ϕ_k und ψ_k verwendet. Diese werden im Falle freier Randbedingungen mithilfe des Verfahrens von Lieb, Schultz und Mattis bestimmt und im Falle periodischer Randbedingungen mit dem Verfahren von Iglói und Turban. Um nun die Zeitentwicklung der Pauli-Spinoperatoren $\hat{\sigma}_i^x$, die in den Korrelationsfunktionen sowie der lokalen Magnetisierung auftreten, bestimmen zu können, werden diese mithilfe von (3.3) und (3.11) über die Fermioperatoren \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i ausgedrückt, deren Zeitentwicklung soeben hergeleitet wurde:

$$\hat{\sigma}_i^x(t) = \prod_{j=1}^{i-1} \left[(\hat{c}_j^\dagger(t) + \hat{c}_j(t)) (\hat{c}_j^\dagger(t) - \hat{c}_j(t)) \right] (\hat{c}_i^\dagger(t) + \hat{c}_i(t)). \quad (3.94)$$

Mithilfe der Majorana-Fermioperatoren

$$\check{a}_{2i-1} := \hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i = \prod_{j=1}^{i-1} (-\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_j^x, \quad (3.95a)$$

$$i\check{a}_{2i} := \hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i = i \prod_{j=1}^{i-1} (-\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_j^y \quad (3.95b)$$

mit $i = 1, \dots, N$ kann dies geschrieben werden als

$$\hat{\sigma}_i^x(t) = i^{i-1} \prod_{j=1}^{2i-1} \check{a}_j(t). \quad (3.96)$$

Die Majorana-Fermioperatoren sind selbstadjungiert. Sie erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$\{\check{a}_{2i-1}, \check{a}_{2j-1}\} = \{\check{a}_{2i}, \check{a}_{2j}\} = 2\delta_{ij} \quad \text{und} \quad \{\check{a}_{2i-1}, \check{a}_{2j}\} = \{\check{a}_{2i}, \check{a}_{2j-1}\} = 0 \quad (3.97)$$

und es gilt

$$(\check{a}_{2i-1})^2 = (\check{a}_{2i})^2 = 1. \quad (3.98)$$

Ausgedrückt über die Fermioperatoren, in denen der Hamiltonoperator vor bzw. nach dem Quench diagonal ist, lauten die Majorana-Fermioperatoren

$$\check{a}_{2i-1} = \sum_k \phi_k^{(0)}(i) (\hat{\eta}_k^{(0)\dagger} + \hat{\eta}_k^{(0)}), \quad (3.99a)$$

$$i\check{a}_{2i} = \sum_k \psi_k^{(0)}(i) (\hat{\eta}_k^{(0)\dagger} - \hat{\eta}_k^{(0)}) \quad (3.99b)$$

bzw.

$$\check{a}_{2i-1} = \sum_k \phi_k(i) (\hat{\eta}_k^\dagger + \hat{\eta}_k), \quad (3.100a)$$

$$i\check{a}_{2i} = \sum_k \psi_k(i) (\hat{\eta}_k^\dagger - \hat{\eta}_k). \quad (3.100b)$$

Die Darstellung über die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ erlaubt die Bestimmung der Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren zu

$$\check{a}_{2i-1}(t) = \sum_{j=1}^N [P_{2i-1,2j-1}(t) \check{a}_{2j-1} + P_{2i-1,2j}(t) \check{a}_{2j}], \quad (3.101a)$$

$$\check{a}_{2i}(t) = \sum_{j=1}^N [P_{2i,2j-1}(t) \check{a}_{2j-1} + P_{2i,2j}(t) \check{a}_{2j}] \quad (3.101b)$$

mit den zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten

$$P_{2i-1,2j-1}(t) = \sum_k \phi_k(i) \phi_k(j) \cos(\Lambda_k t), \quad (3.102a)$$

$$P_{2i-1,2j}(t) = -\sum_k \phi_k(i) \psi_k(j) \sin(\Lambda_k t), \quad (3.102b)$$

$$P_{2i,2j-1}(t) = \sum_k \psi_k(i) \phi_k(j) \sin(\Lambda_k t), \quad (3.102c)$$

$$P_{2i,2j}(t) = \sum_k \psi_k(i) \psi_k(j) \cos(\Lambda_k t). \quad (3.102d)$$

Die Koeffizienten $P_{i,j}(t)$ der Zeitentwicklung sind dabei rein reell.

Die Relationen (3.102a) bis (3.102d) können zusammengefasst werden zu

$$\check{a}_i(t) = \sum_{j=1}^{2N} P_{i,j}(t) \check{a}_j, \quad i = 1, \dots, 2N. \quad (3.103)$$

3.3.1 Korrelationsfunktionen

Mithilfe von (3.94) kann die Autokorrelationsfunktion (3.78) über die im vorangegangenen Kapitel eingeführten Majorana-Fermioperatoren ausgedrückt werden als

$$C^{xx}(r, t; r, 0) = (-1)^r \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_1(t) \dots \check{a}_{2r-1}(t) \check{a}_1 \dots \check{a}_{2r-1} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.104)$$

Das in der gleichzeitigen Korrelationsfunktion auftretende Produkt $\hat{\sigma}_{r_1}^x(t) \hat{\sigma}_{r_2}^x(t)$ kann unter Verwendung der Antikommutatorrelationen (3.97) der Majorana-Fermioperatoren sowie (3.98) vereinfacht werden zu

$$\hat{\sigma}_{r_1}^x(t) \hat{\sigma}_{r_2}^x(t) = i^{r_2-r_1} \prod_{i=2r_1}^{2r_2-1} \check{a}_i(t) . \quad (3.105)$$

Die Anzahl der zu betrachtenden Majorana-Fermioperatoren hängt somit vom Abstand der beiden Positionen innerhalb der Kette ab und die gleichzeitige Korrelationsfunktion (3.82) kann in Termen der Majorana-Fermioperatoren geschrieben werden als

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) = i^{r_2-r_1} \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2r_1}(t) \dots \check{a}_{2r_2-1}(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.106a)$$

Das Wicksche Theorem [221] erlaubt nun, die auftretenden Erwartungswerte mehrerer Majorana-Fermioperatoren durch Summen von Produkten von Erwartungswerten jeweils zweier Majorana-Fermioperatoren auszudrücken. Hierzu wird die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte der Majorana-Fermioperatoren zunächst über (3.103) auf die Koeffizienten $P_{i,j}(t)$ ausgelagert, sodass nur noch Erwartungswerte zeitunabhängiger Majorana-Fermioperatoren zu bestimmen sind. Diese werden gemäß (3.99) über die Fermioperatoren ausgedrückt, dargestellt über die der Hamiltonoperator \hat{H}_0 vor dem Quench Diagonalgestalt hat. In dieser Darstellung kann nun das Wicksche Theorem für den Grundzustandserwartungswert angewendet werden, da die Anwendung eines Vernichters auf den Grundzustand null ergibt. Nur die vollständig kontrahierten Terme¹ verschwinden nicht identisch. Da der Grundzustandserwartungswert eines normalgeordneten Produktes verschwindet, können die Kontraktionen somit als Grundzustandserwartungswerte des zeitgeordneten Produktes der entsprechenden Operatoren geschrieben werden. Hierbei ist für Fermioperatoren noch ein durch die Anzahl der notwendigen Vertauschungen zur Herstellung der Zeitordnung bestimmtes Vorzeichen zu beachten. Werden nun die Operatoren in den verbleibenden Erwartungswerten wieder zu den Majorana-Fermioperatoren zusammengefasst sowie die Koeffizienten der Zeitentwicklung wieder in diese hineingezogen, so zeigt sich, dass das Ergebnis dasselbe ist, als wären die Kontraktionen direkt über die zeitabhängigen Majorana-Fermioperatoren gebildet worden. Die verbleibende Summe über Produkte der Grundzustandserwartungswerte jeweils zweier Majorana-Fermioperatoren kann in kompakter Form als *Pfaffsche Determinante*² geschrieben werden. Die auftretenden Vorzeichen werden durch die Vorschrift zur Berechnung der Determinante korrekt berücksichtigt.

Dargestellt als Pfaffsche Determinante lautet die Autokorrelationsfunktion

$$C^{xx}(r, t; r, 0) = (-1)^{r-1} \begin{vmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{T} \\ & \mathbf{U} \end{vmatrix} \quad (3.107)$$

mit

$$\mathbf{S} = \left. \begin{array}{cccc} \overbrace{S_{1,2} \quad S_{1,3} \quad \dots \quad S_{1,2r-1}}^{2r-2} \\ S_{2,3} \quad \dots \quad S_{2,2r-1} \\ \vdots \\ S_{2r-2,2r-1} \end{array} \right\}_{2r-2} , \quad \mathbf{T} = \left. \begin{array}{cccc} \overbrace{T_{1,1} \quad T_{1,2} \quad \dots \quad T_{1,2r-1}}^{2r-1} \\ T_{2,1} \quad T_{2,2} \quad \dots \quad T_{2,2r-1} \\ \vdots \\ T_{1,2r-1} \quad T_{2,2r-1} \quad \dots \quad T_{2r-1,2r-1} \end{array} \right\}_{2r-1}$$

¹Unter der Kontraktion zweier Operatoren ist die Differenz ihres zeit- und ihres normalgeordneten Produktes zu verstehen.

²Die Determinante einer schiefsymmetrischen Matrix kann als das Quadrat des Polynoms ihrer Einträge geschrieben werden. Dieses Polynom wird als Pfaffsche Determinante der Matrix bezeichnet.

und

$$\mathbf{U} = \left. \begin{array}{cccc} \overbrace{U_{1,2} & U_{1,3} & \dots & U_{1,2r-1}}^{2r-2} \\ & U_{2,3} & \dots & U_{2,2r-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & U_{2r-2,2r-1} \end{array} \right\} 2r-2 .$$

Für die gleichzeitige Korrelationsfunktion ergibt sich

$$C^{xx}(r_1, t; r_2, t) = \iota^{r_2-r_1} |\mathbf{S}| \quad (3.108)$$

mit

$$\mathbf{S} = \left. \begin{array}{cccc} \overbrace{S_{2r_1,2r_1+1} & S_{2r_1,2r_1+2} & \dots & S_{2r_1,2r_2-1}}^{2(r_2-r_1)-1} \\ & S_{2r_1+1,2r_1+2} & \dots & S_{2r_1+1,2r_2-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & S_{2r_2-2,2r_2-1} \end{array} \right\} 2(r_2-r_1)-1 \quad (3.109)$$

Bei den Einträgen der Pfaffschen Determinanten handelt es sich jeweils um Erwartungswerte zweier Majorana-Fermioperatoren. Sie sind gegeben durch

$$S_{i,j} = \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.110a)$$

$$T_{i,j} = \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.110b)$$

$$U_{i,j} = \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.110c)$$

Die zeitabhängigen Erwartungswerte (3.110a) und (3.110b) können mithilfe von (3.103) über zeitunabhängige Erwartungswerte ausgedrückt werden:

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} P_{i,m}(t) \sum_{n=1}^{2N} P_{j,n}(t) \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \check{a}_n | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.111a)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} P_{i,m}(t) \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.111b)$$

Diese können mit (3.99) bestimmt werden zu

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i-1} \check{a}_{2j-1} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} , \quad (3.112a)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i-1} \check{a}_{2j} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \iota G_{j,i}^{(0)} , \quad (3.112b)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i} \check{a}_{2j-1} | \Psi_0^{(0)} \rangle = -\iota G_{i,j}^{(0)} , \quad (3.112c)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i} \check{a}_{2j} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} , \quad (3.112d)$$

wobei

$$G_{i,j}^{(0)} = - \sum_k \psi_k^{(0)}(i) \phi_k^{(0)}(j) . \quad (3.113)$$

Mithilfe von (3.112a) bis (3.112d) können die zeitabhängigen Erwartungswerte (3.111a) und (3.111b) geschrieben werden als

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} + \iota \Gamma_{i,j}(t) \quad (3.114)$$

mit

$$\Gamma_{i,j}(t) = \sum_{m,n=1}^N [G_{n,m}^{(0)} P_{i,2m-1}(t) P_{j,2n}(t) - G_{m,n}^{(0)} P_{i,2m}(t) P_{j,2n-1}(t)] \quad (3.115)$$

sowie

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle = \begin{cases} P_{i,j}(t) + \imath \sum_{m=1}^N G_{n,m}^{(0)} P_{i,2m-1}(t) & \text{für } j = 2n \\ P_{i,j}(t) - \imath \sum_{m=1}^N G_{m,n}^{(0)} P_{i,2m}(t) & \text{für } j = 2n - 1 \end{cases} . \quad (3.116)$$

Die Auswertung der Pfaffschen Determinanten erfolgt durch Berechnung der Determinanten der zugehörigen schiefsymmetrischen Matrizen und anschließende Bildung der Quadratwurzel. Aufgrund der Wahlfreiheit des Vorzeichens bei der Bildung der Quadratwurzel wird im Folgenden lediglich der Betrag betrachtet.

3.3.2 Lokale Magnetisierung

Wie die im vorherigen Abschnitt betrachteten Korrelationsfunktionen kann die lokale Magnetisierung (2.6) mithilfe von (3.94) über die Majorana-Fermioperatoren ausgedrückt werden:

$$m_\ell^x(t) = \imath^\ell \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_1(t) \dots \check{a}_{2\ell-1}(t) | \Psi_1^{(0)} \rangle . \quad (3.117)$$

Das weitere Vorgehen verläuft analog zu den Korrelationsfunktionen. Um das Wicksche Theorem anwenden zu können, ist allerdings noch der erste angeregte Zustand $|\Psi_1^{(0)}\rangle$ des Hamiltonoperators \hat{H}_0 vor dem Quench über den Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ auszudrücken gemäß

$$|\Psi_1^{(0)}\rangle = \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} |\Psi_0^{(0)}\rangle , \quad (3.118)$$

sodass

$$m_\ell^x(t) = \imath^\ell \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_1(t) \dots \check{a}_{2\ell-1}(t) \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.119)$$

k_0 bezeichne hierbei allgemein die Wellenzahl der Mode mit der geringsten Energie. Für das System mit freien Randbedingungen in der ferromagnetischen Phase ist $k_0 = \nu$ die komplexwertige Wellenzahl. In der paramagnetischen Phase ist $k_0 = 0$. Auf die gleiche Weise wie für die Korrelationsfunktionen kann wiederum gezeigt werden, dass das Wicksche Theorem angewendet werden kann. Mit seiner Hilfe kann die lokale Magnetisierung durch die folgende Pfaffsche Determinante dargestellt werden:

$$m_\ell^x(t) = \imath^{\ell-1} |\mathbf{S} \mathbf{V}| \quad (3.120)$$

mit

$$\mathbf{S} = \left. \begin{array}{cccc} \overbrace{S_{1,2} \quad S_{1,3} \quad \dots \quad S_{1,2\ell-1}}^{2\ell-2} \\ S_{2,3} \quad \dots \quad S_{2,2\ell-1} \\ \vdots \\ S_{2\ell-2,2\ell-1} \end{array} \right\}^{2\ell-2} \quad \text{und} \quad \mathbf{V} = \left. \begin{array}{c} \overbrace{V_{1,k_0}}^1 \\ V_{2,k_0} \\ \vdots \\ V_{2\ell-1,k_0} \end{array} \right\}^{2\ell-1} .$$

Die $S_{i,j}$ sind dabei definiert gemäß (3.110a) und für die V_{i,k_0} gilt

$$V_{i,k_0} = \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.121)$$

Zur Auswertung der Erwartungswerte werden die zeitabhängigen Majorana-Fermioperatoren mithilfe von (3.103) umgeschrieben:

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} P_{i,m}(t) \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.122)$$

Die nun zeitunabhängigen Erwartungswerte ergeben sich zu

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i} \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \phi_{k_0}^{(0)}(i), \quad (3.123a)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_{2i-1} \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \psi_{k_0}^{(0)}(i), \quad (3.123b)$$

sodass schließlich gilt

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^N [P_{i,2m-1}(t) \phi_{k_0}^{(0)}(m) + \nu P_{i,2m}(t) \psi_{k_0}^{(0)}(m)]. \quad (3.124)$$

3.3.3 Verschränkungsentropie

Es verbleibt noch die Bestimmung der Verschränkungsentropie nach (3.88). Das hierzu verwendete Verfahren wurde in [204, 205] hergeleitet und stellt das Standardverfahren zur Bestimmung der Verschränkungsentropie im Ising- und XY-Modell dar [33, 36, 40, 67–69]. Es wurde gezeigt, dass die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_\ell$ aus der $2\ell \times 2\ell$ -dimensionalen reduzierten Korrelationsmatrix

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} + \nu (\Gamma_\ell^A)_{i,j}(t) \quad (3.125)$$

rekonstruiert werden kann, wobei die Werte von i und j über alle Positionen von Subsystem A laufen. Die \check{a}_m sind die Majorana-Fermioperatoren nach (3.95) und $\Gamma_\ell^A(t)$ ist die schiefssymmetrische Matrix mit den Einträgen gemäß (3.115). Im Falle periodischer Randbedingungen hängen die Matrixelemente nur von dem Abstand der Positionen ab, auf die die Majorana-Fermioperatoren wirken. Γ_ℓ^A ist dann eine schiefssymmetrische Block-Toeplitz-Matrix.

Die Matrix Γ_ℓ^A kann durch eine orthogonale Transformation, deren Matrixdarstellung mit Q bezeichnet werde, auf Blockdiagonalgestalt gebracht werden [40, 205]:

$$Q(t) \Gamma_\ell^A(t) Q^T(t) = \begin{bmatrix} 0 & \nu_1(t) & 0 & 0 & \dots \\ -\nu_1(t) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \nu_2(t) & \\ 0 & 0 & -\nu_2(t) & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \ddots & 0 & \nu_\ell(t) \\ & & & & & -\nu_\ell(t) & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.126)$$

Die Eigenwerte von $\Gamma_\ell^A(t)$ ergeben sich aus dieser Darstellung zu $\pm \nu_i(t)$ mit $i = 1, \dots, \ell$. Die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_\ell$ des Subsystem A der Länge ℓ kann somit als direktes Produkt

$$\hat{\rho}_\ell = \bigotimes_{i=1}^{\ell} \hat{\varrho}_i \quad (3.127)$$

der ℓ Dichtematrizen $\hat{\varrho}_i$ mit Eigenwerten

$$\frac{1 \pm \nu_i(t)}{2}, \quad i = 1, \dots, \ell \quad (3.128)$$

dargestellt werden. Ihre Eigenwerte sind durch die Eigenwerte der $\hat{\varrho}_i$ gegeben, sodass die Verschränkungsentropie der beiden Subsysteme geschrieben werden kann als

$$S_\ell(t) = - \sum_{i=1}^{\ell} \left[\frac{1 + \nu_i(t)}{2} \ln \left(\frac{1 + \nu_i(t)}{2} \right) + \frac{1 - \nu_i(t)}{2} \ln \left(\frac{1 - \nu_i(t)}{2} \right) \right]. \quad (3.129)$$

Das hier beschriebene Verfahren zur Bestimmung der Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie kann sowohl auf das System mit freien als auch auf das System mit periodischen Randbedingungen angewendet werden.

Bemerkungen

Die mithilfe der in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Freie-Fermionen-Technik gewonnenen Resultate sind exakt. Sie werden im folgenden Kapitel als Referenz für die Ergebnisse der semiklassischen Theorie zur Beschreibung des Relaxationsprozesses des eindimensionalen transversalen XY-Modells dienen. Die Bezeichnung Freie-Fermionen-Technik rührt daher, dass das Verfahren auf der Diagonalisierung des Hamiltonoperators durch die Transformation auf ein System nicht wechselwirkender (freier) Fermionen beruht. Das Verfahren weist zwei entscheidende Vorteile auf. Zum einen sind für ein System aus N Spins lediglich zwei Matrizen der Dimension $N \times N$ (Verfahren von Lieb, Schultz und Mattis) bzw. eine Matrix der Dimension $2N \times 2N$ (Verfahren von Iglói und Turban) zu diagonalisieren entgegen der direkten Diagonalisierung des Hamiltonoperators, dessen Matrixdarstellung von der Dimension $2^N \times 2^N$ ist. Die Dimension der zu diagonalisierenden Matrix wächst also nicht exponentiell mit der Systemgröße, sondern algebraisch, wodurch die Betrachtung größerer Systeme erst möglich wird. Zum anderen ist für die Freie-Fermionen-Technik die Kenntnis der genauen Form des Grundzustandes nicht erforderlich. Zur Berechnung der Zeitentwicklung der Observablen wird lediglich die Grundzustandseigenschaft ausgenutzt, dass im Grundzustand keine energetische Mode angeregt ist, Anwendung eines Vernichters $\hat{\eta}_k^{(0)}$ auf ihn also immer null ergibt.

3.4 Semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses

Das im vorherigen Kapitel beschriebene Verfahren zur Diagonalisierung des Hamiltonoperators durch Transformation auf ein System freier Fermionen erlaubt es, die Zeitentwicklung des Systems nach einem Quench auch für große Systemgrößen exakt zu bestimmen, liefert jedoch keine anschauliche Erklärung für die Vorgänge innerhalb des Systems während des Relaxationsprozesses. Eine derartige Beschreibung wird im Rahmen der im Folgenden erläuterten semiklassischen Theorie möglich sein, die den Relaxationsprozess des Systems nach dem Quench mithilfe von durch den Quench erzeugten und sich im Anschluss daran ballistisch ohne Wechselwirkung untereinander durch das System bewegenden Quasiteilchen beschreibt. Die Anfänge der semiklassischen Theorie gehen zurück auf Sachdev und Young, die 1997 in [222] eine semiklassische Erklärung für den Relaxationsprozess des eindimensionalen transversalen Ising-Modells bei endlicher Temperatur aufgestellt haben. Die Erzeugung der Quasiteilchen erfolgte hierbei durch die thermische Exzessenergie innerhalb des Systems bedingt durch die endliche Temperatur. Erstmalige Verwendung bei der Beschreibung von Relaxationsprozessen nach einem Quench fand die semiklassische Theorie 2009 bzw. 2010 in [39, 41] durch Rossini *et al.* zur Herleitung von Ausdrücken für die Relaxationszeit τ und die Korrelationslänge ξ des transversalen Ising-Modells. In der Folgezeit konnten Rieger und Iglói im Jahre 2011 den zeitlichen Verlauf der Observablen im transversalen Ising-Modell mit durch endlicher Systemgröße bedingten Randeffekten nach einem Quench in [43] zunächst qualitativ und in [45] auch quantitativ beschreiben. Als entscheidende Größen im Rahmen der semiklassischen Theorie haben sich hierbei die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Quench sowie ihre Geschwindigkeit erwiesen. Es hat sich gezeigt, dass der durch Rieger und Iglói mittels störungstheoretischer Argumente bestimmte Ausdruck für die Besetzungszahl der Quasiteilchen im transversalen Ising-Modell bei Betrachtung schwacher Quenchs gute Ergebnisse liefert, sich jedoch für stärkere Quenchs und für Quenchs des transversalen XY-Modells, welche auch die Anisotropie ändern, Abweichungen ergeben. Aus einem von Calabrese, Essler und Fagotti in [44, 47] bestimmten exakten Ausdruck für die Zeitentwicklung von Korrelationsfunktionen im transversalen Ising-Modell konnte eine modifizierte Besetzungszahl hergeleitet werden, welche auch die exakte Beschreibung stärkerer Quenchs des transversalen Ising-Modells mithilfe der semiklassischen Theorie erlaubte. 2012 konnte in [68] schließlich aus einem exakten Ausdruck für die Zeitentwicklung von Korrelationsfunktionen im transversalen XY-Modell analog zu demjenigen für das transversale Ising-Modell von Calabrese, Essler und Fagotti aus [44, 47] eine modifizierte Besetzungszahl nach Quenchs im transversalen XY-Modell gewonnen werden, unter deren Verwendung die Resultate der semiklassischen Theorie auch hier eine gute Übereinstimmung zu den exakten Resultaten aufgewiesen haben.

Im Folgenden werden die Grundlagen der semiklassischen Theorie und ihre Anwendung zur Beschreibung des Relaxationsprozesses nach einem Quench nach [43, 45] erläutert. Nach einer anschaulichen Interpretation der Quasiteilchen wird ihre Erzeugung durch den Quench beschrieben und es werden Ausdrücke für ihre Besetzungszahl und Geschwindigkeit hergeleitet. Weiterhin wird ein Bezug zwischen den Besetzungszahlen der Quasiteilchen und den Erhaltungsgrößen im verallgemeinerten Gibbs-Ensemble hergestellt. Ausgehend hiervon wird auf die Bestimmung der Observablen mithilfe der semiklassischen Theorie eingegangen. Abschließend werden die Resultate der semiklassischen Theorie mit den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik für die Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie zweier Subsysteme, der lokalen Magnetisierung und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins im transversalen XY-Modell nach einem Quench verglichen. Dabei werden sowohl Systeme mit freien als auch Systeme mit periodischen Randbedingungen betrachtet.

3.4.1 Quasiteilchencharakteristik

Zu Beginn der Betrachtungen zur semiklassischen Theorie soll eine anschauliche Interpretation der Quasiteilchen gegeben werden. Es werde dabei zunächst die ferromagnetische Phase betrachtet. Ausgehend vom vollständig geordneten Zustand für $h = 0$ haben Rieger und Iglói in [45] gezeigt, dass es sich im transversalen Ising-Modell mit freien Randbedingungen für kleines Transversalfeld bei den niedrigen energetisch angeregten Zustände in erster Ordnung entarteter Störungstheorie um die Fourier-Transformierten von Basiszuständen mit einem einzelnen Kink handelt. Unter einem Kink ist hierbei eine Domänengrenze bzw. ein gebrochenes Bond zu verstehen, d. h. das Aufeinandertreffen eines Spin up und eines Spin down (Abbildung 3.4 (a)). Frei propagierende Kinks stellen infolgedessen Wellenpakete energetisch niedrig liegender Anregungen dar. Ihre Energie entspricht in erster Ordnung Störungstheorie den Energien der

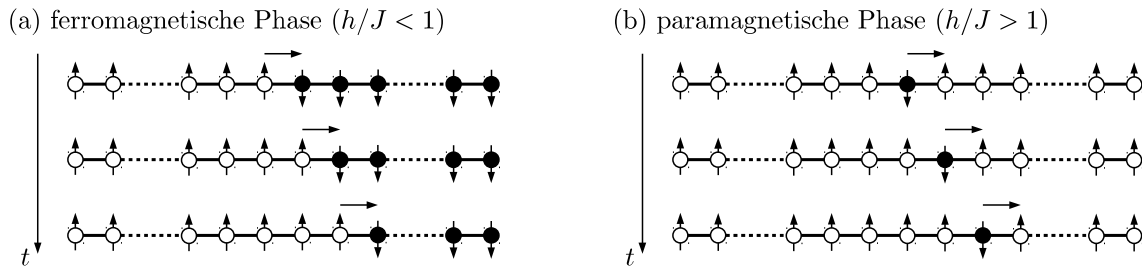


Abbildung 3.4: Quasiteilchen im eindimensionalen transversalen Ising-Modell mit freien Randbedingungen. In der ferromagnetischen Phase (a) können die Quasiteilchen mit einem Kink identifiziert werden, in der paramagnetischen Phase (b) mit einem einzelnen entgegengesetzt zu seinen nächsten Nachbarn orientierten Spin. Die Quasiteilchen werden durch den Quench erzeugt und bewegen sich anschließend mit konstanter Geschwindigkeit ohne Wechselwirkung untereinander durch das System.

Moden des Hamiltonoperators

$$\Lambda_k = \sqrt{h^2 + J^2 - 2Jh \cos(k)} = \sqrt{J^2 \sin^2(k) + (J \cos(k) - h)^2} \quad (3.130)$$

und ihre Geschwindigkeit ist gegeben durch die partielle Ableitung der Energie nach der Wellenzahl

$$v_k = \frac{\partial \Lambda_k}{\partial k} = \frac{Jh \sin(k)}{\Lambda_k}. \quad (3.131)$$

Die sich ballistisch mit konstanter Geschwindigkeit v_k und ohne Wechselwirkung untereinander durch die Kette bewegend Kinks stellen in der ferromagnetischen Phase die Quasiteilchen der semiklassischen Theorie dar. Ausgehend von der Herleitung von Rieger und Iglói sind die Quasiteilchen zunächst nur für kleine Felder, d. h. tief in der ferromagnetischen Phase definiert. Es konnte jedoch in [45] gezeigt werden, dass die semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses nahezu im gesamten Phasenraum gute Resultate liefert. In der paramagnetischen Phase sind die Quasiteilchen wie bei Sachdev und Young in [222] im Falle endlicher Temperatur, für die das eindimensionale System immer ungeordnet ist, mit einzelnen Spin down inmitten von Spin up bzw. einzelnen Spin up inmitten von Spin down zu identifizieren (Abbildung 3.4 (b)). Dies kann ebenfalls störungstheoretisch ausgehend vom Zustand für $h \rightarrow \infty$ gezeigt werden, in dem alle Spins parallel zum Transversalfeld orientiert sind. Die Quasiteilchen in der paramagnetischen Phase weisen die gleiche Dispersionsrelation und Geschwindigkeit auf wie die in der ferromagnetischen Phase. Lediglich nahe des kritischen Punktes existieren keine wohldefinierten Quasiteilchen, sodass die semiklassische Theorie nicht für Quenches angewendet werden kann, die in der Nähe des kritischen Punktes enden.

Nach der Beschreibung der Gestalt der Quasiteilchen werde nun auf ihre Erzeugung durch den Quench eingegangen. Hierzu werde zunächst wiederum wie in [45] das transversale Ising-Modell betrachtet. Die Erzeugung von Quasiteilchen im System erfolgt immer paarweise. Die Quasiteilchen eines Paares sind nach [35] verschränkt und haben aufgrund der Impulserhaltung entgegengesetzte Impulse. Quasiteilchen hingegen, die an unterschiedlichen Positionen der Spinkette erzeugt wurden, sind nicht verschränkt und werden als inkohärent bezeichnet. Zur genaueren Untersuchungen der Erzeugung der Quasiteilchen werde nun der Zustand des Systems für sehr kleine Zeiten nach dem Quench betrachtet. Dieser kann approximiert werden in der Form

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \exp[-i\hat{H}t] |\Psi_0^{(0)}\rangle \\ &\approx \exp\left[-i\left(-\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x\right)t\right] \exp\left[-i\left(-\frac{h}{2} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z\right)t\right] |\Psi_0^{(0)}\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{N-1} \exp\left[\frac{J}{2} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x t\right] \prod_{j=1}^N \exp\left[\frac{h}{2} \hat{\sigma}_j^z t\right] |\Psi_0^{(0)}\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{N-1} \left[\cos\left(\frac{J}{2}t\right) + \imath \sin\left(\frac{J}{2}t\right) \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x\right] \prod_{j=1}^N \left[\cos\left(\frac{h}{2}t\right) + \imath \sin\left(\frac{h}{2}t\right) \hat{\sigma}_j^z\right] |\Psi_0^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (3.132)$$

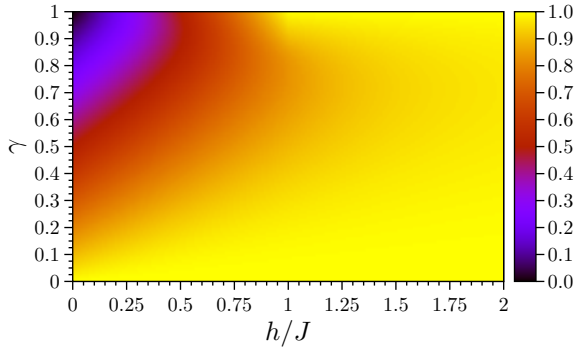


Abbildung 3.5: Numerisch bestimmte Werte der Maximalgeschwindigkeit der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie in Einheiten der Kopplungskonstante J nach einem Quench im eindimensionalen transversalen XY-Modell in Abhängigkeit von den Parametern h/J und γ des Hamiltonoperators nach dem Quench. Die Geschwindigkeit der Quasiteilchen wird ausschließlich von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench bestimmt. J stellt eine obere Schranke für v_{\max} dar.

Anhand dieser Darstellung wird die Wirkung des Quenches auf das System ersichtlich. Während die $\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x$ nur die Orientierung der Spins abfragen, werden durch die $\hat{\sigma}_j^z$ einzelne Spins umgeklappt. Hierdurch wird an jeder Position der Kette zu jeder Wellenzahl k ein Paar von Quasiteilchen erzeugt. Unter der Zeitentwicklung des Systems bewirken die $\hat{\sigma}_j^z$ auch die Propagation der Quasiteilchen. Für das transversale XY-Modell ergibt sich in Analogie zu (3.132) folgende Näherung des Zustandes des Systems für kleine Zeiten

$$\begin{aligned}
 |\Psi(t)\rangle &= \prod_{i=1}^{N-1} \left[\cos\left(\frac{J(1+\gamma)t}{4}\right) + \imath \sin\left(\frac{J(1+\gamma)t}{4}\right) \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x \right] \prod_{j=1}^{N-1} \left[\cos\left(\frac{J(1-\gamma)t}{4}\right) + \imath \sin\left(\frac{J(1-\gamma)t}{4}\right) \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y \right] \\
 &\times \prod_{k=1}^N \left[\cos\left(\frac{h}{2}t\right) + \imath \sin\left(\frac{h}{2}t\right) \hat{\sigma}_k^z \right] |\Psi_0^{(0)}\rangle . \tag{3.133}
 \end{aligned}$$

Quasiteilchen werden im transversalen XY-Modell somit nicht nur durch die Wirkung der $\hat{\sigma}_k^z$ erzeugt, sondern auch durch die $\hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y$, wobei die durch $\hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y$ erzeugten Paare von Quasiteilchen nicht an einer Position der Kette entstehen, sondern an zwei benachbarten Positionen. Die Propagation der Quasiteilchen wird ebenfalls nicht nur durch die $\hat{\sigma}_k^z$, sondern auch durch die $\hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y$ hervorgerufen. Die Resultate von [68] zeigen, dass trotz der beschriebenen Unterschiede zwischen dem transversalen Ising- und dem transversalen XY-Modell die semiklassische Theorie auch zur Beschreibung des Relaxationsprozesses des transversalen XY-Modells geeignet ist. Für dieses ist die Energie der Quasiteilchen gegeben durch

$$\Lambda_k = \sqrt{h^2 + J^2\gamma^2 - 2Jh \cos(k) + J^2(1 - \gamma^2) \cos^2(k)} = \sqrt{J^2\gamma^2 \sin^2(k) + (J \cos(k) - h)^2} \tag{3.134}$$

und ihre Geschwindigkeit ergibt sich als die partielle Ableitung der Energie nach der Wellenzahl

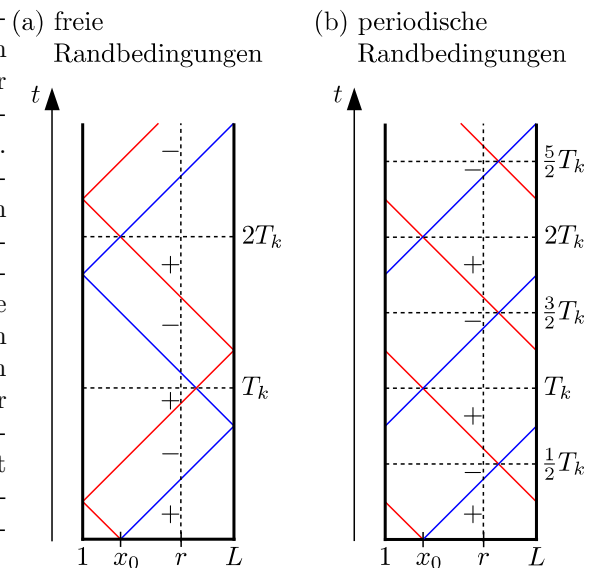
$$v_k = \frac{\partial \Lambda_k}{\partial k} = \frac{J \sin(k)(h - J(1 - \gamma^2) \cos(k))}{\Lambda_k} . \tag{3.135}$$

Insbesondere hängt die Geschwindigkeit der Quasiteilchen nur von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench ab. Während die Geschwindigkeit im Falle des transversalen Ising-Modells ($\gamma = 1$) stets positiv ist, treten im Falle des transversalen XY-Modells nach (3.135) auch negative Geschwindigkeiten auf, wenn $h/J < 1 - \gamma^2$ ist. Dies wurde im Abschnitt zum Spektrum des Hamiltonoperators ausführlich diskutiert, als das Auftreten eines Minimums der Λ_k im Innern des Intervalls von 0 bis π untersucht wurde. Für die semiklassische Theorie ist das Vorzeichen der Geschwindigkeit unerheblich, da die Quasiteilchen immer paarweise mit Geschwindigkeiten v_k und $-v_k$ erzeugt werden. Aus diesem Grund wird im Folgenden immer der Betrag der Geschwindigkeit betrachtet und die Maximalgeschwindigkeit v_{\max} der Quasiteilchen über die Beträge bestimmt.

Die Maximalgeschwindigkeit v_{\max} der Quasiteilchen bestimmt die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Störung innerhalb des Systems nach dem Quench. Für das transversale Ising-Modell ($\gamma = 1$) ist

$$v_{\max} = \begin{cases} h & , \text{ falls } h/J < 1 \\ J & , \text{ falls } h/J > 1 \end{cases} . \tag{3.136}$$

Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Bewegung eines an der Position x_0 der Kette durch den Quench erzeugten Paares von Quasiteilchen zu einer Wellenzahl k für das System mit (a) freien Randbedingungen bzw. (b) periodischen Randbedingungen. Aufgrund der Impulserhaltung haben die Quasiteilchen des Paares einen entgegengesetzten Impuls. Im Falle freier Randbedingungen werden die Quasiteilchen an den Enden der Kette reflektiert, im Falle periodischer Randbedingungen laufen sie um die Kette herum. Dies erklärt die für freie Randbedingungen doppelte Periodendauer im Vergleich zu periodischen Randbedingungen. Zusätzlich ist für den Spin an der Position r der Kette angegeben, ob er von den Quasiteilchen des betrachteten Paares zu einem Zeitpunkt t mit gerader (+) oder ungerader (-) Häufigkeit passiert wurde. Abbildung (a) wurde [45] nachempfunden.



Die Maximalgeschwindigkeit der Quasiteilchen steigt also in der ferromagnetischen Phase linear mit der Stärke des transversalen Feldes h an und hat in der paramagnetischen Phase den konstanten Wert J . Für das transversale XY-Modell ($0 < \gamma < 1$) besteht kein derart einfacher analytischer Zusammenhang zwischen den Parametern des Hamiltonoperators und v_{\max} . Abbildung 3.5 zeigt aus diesem Grund numerisch bestimmte Werte für v_{\max} . Für kleine Verhältnisse h/J steigt die Maximalgeschwindigkeit mit abnehmender Anisotropie γ an. Wie für das transversale Ising-Modell stellt J auch für $\gamma < 1$ eine obere Schranke von v_{\max} dar. Die Bewegung der Quasiteilchen durch die Spinkette erfolgt mit der ihrer Wellenzahl k entsprechenden Geschwindigkeit v_k , deren Betrag zeitlich konstant ist. In Abbildung 3.6 wird die Bewegung eines an der Position x_0 der Spinkette erzeugten Quasiteilchenpaares im Raum-Zeit-Diagramm illustriert. Für freie Randbedingungen werden die Quasiteilchen an den Enden der Kette reflektiert (Abbildung 3.6 (a)). Im Falle periodischer Randbedingungen laufen die Quasiteilchen um die Kette herum (Abbildung 3.6 (b)). Mit der Definition der Periodendauer nach [45] als die Zeit, nach der sich die Quasiteilchen wieder an der Position befinden, an der sie durch den Quench erzeugt wurden, und sich in die Richtung bewegen, in die sie nach ihrer Erzeugung gestartet sind, ergibt sich für freie Randbedingungen die doppelte Periodendauer wie für periodische Randbedingungen. Weiterhin ist die Periodendauer aufgrund der unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Quasiteilchen zu verschiedenen Wellenzahlen ebenfalls von k abhängig. Mit der Zeit

$$T_k := \frac{L}{|v_k|}, \quad (3.137)$$

die ein Quasiteilchen zur Wellenzahl k benötigt, um die Kette der Länge L einmal zu durchlaufen, folgt für die Periodendauer im Falle freier Randbedingungen

$$T_{\text{period},k}^{\text{FRB}} = 2T_k \quad (3.138)$$

und für die Periodendauer im Falle periodischer Randbedingungen

$$T_{\text{period},k}^{\text{PRB}} = T_k. \quad (3.139)$$

Die Position der beiden Quasiteilchen des an der Position x_0 zum Zeitpunkt $t = 0$ durch den Quench erzeugten Quasiteilchenpaares zu einem beliebigen Zeitpunkt $t > 0$ kann folgendermaßen bestimmt werden. Bezeichne hierzu $x_a(t)$ die Position des Quasiteilchens a , welches ursprünglich nach links gestartet ist (rote Trajektorie in Abbildung 3.6), und $x_b(t)$ die Position des Quasiteilchens b , welches ursprünglich nach rechts gestartet ist (blaue Trajektorie in Abbildung 3.6). Der Betrag der Geschwindigkeit der Quasiteilchen sei $|v_k|$. Sei t_a die Zeit, nach der Quasiteilchen a zum ersten Mal den linken Rand der Kette erreicht, und t_b die Zeit, nach der Quasiteilchen b zum ersten Mal den rechten Rand der Kette erreicht.

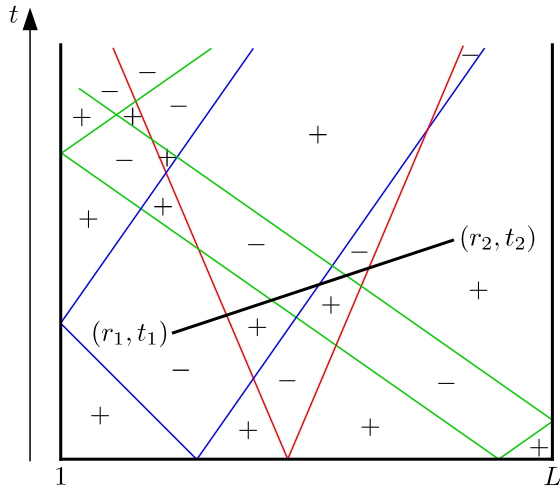


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung des Beitrages von drei an unterschiedlichen Positionen der Kette erzeugten Paaren von Quasiteilchen zu verschiedenen Wellenzahlen k zur Korrelationsfunktion $C^{xx}(r_1, t_1; r_2, t_2)$. $\hat{\sigma}_{r_1}^x(t_1)$ und $\hat{\sigma}_{r_2}^x(t_2)$ haben unterschiedliche Vorzeichen, da zwischen ihrer Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$ und den Quasiteilchentrajektorien eine ungerade Anzahl an Schnittpunkten existiert. Quasiteilchenpaare, für die die Anzahl der Schnittpunkte gerade ist (rot und grün), leisten dabei keine Beitrag. Die Steigung der Trajektorien der Quasiteilchen hängt von der Wellenzahl k ab und ist gegeben durch die inverse Geschwindigkeit $|v_k|^{-1}$. Die Abbildung wurde [45] nachempfunden.

Offensichtlich gilt

$$t_a = \frac{x_0}{|v_k|}, \quad (3.140a)$$

$$t_b = \frac{L - x_0}{|v_k|}. \quad (3.140b)$$

Bei den weiteren Überlegungen ergeben sich in Abhängigkeit von den Randbedingungen Unterschiede. Es werde zunächst der Fall freier Randbedingungen betrachtet. Für diese gilt für $t < T_k$

$$x_a(t) = \begin{cases} x_0 - |v_k|t & \text{für } 0 \leq t < t_a \\ |v_k|t - x_0 & \text{für } t_a \leq t < T_k \end{cases}, \quad (3.141a)$$

$$x_b(t) = \begin{cases} x_0 + |v_k|t & \text{für } 0 \leq t < t_b \\ 2L - x_0 - |v_k|t & \text{für } t_b \leq t < T_k \end{cases}. \quad (3.141b)$$

Zum Zeitpunkt $t = T_k$ treffen sich die beiden Quasiteilchen des betrachteten Quasiteilchenpaares an der Position $L - x_0$. Für $T_k \leq t < 2T_k$ ergeben sich entsprechende Beziehungen und für $t \geq 2T_k$ kann die Periodizität der Bewegung der Quasiteilchen mit Periodendauer $2T_k$ ausgenutzt werden.

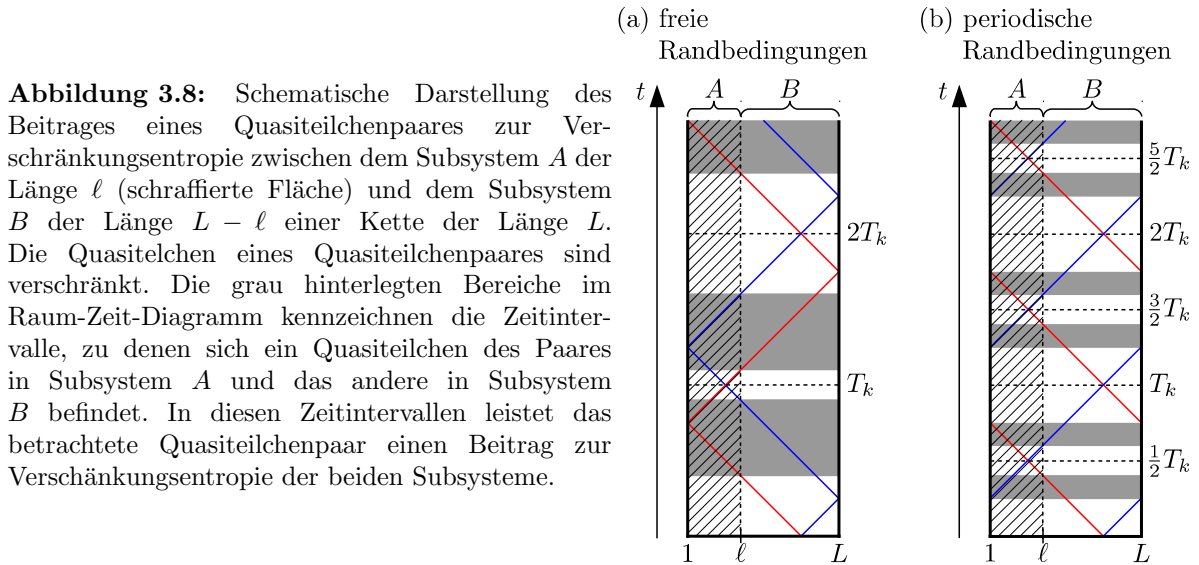
Für periodische Randbedingungen müssen keine Reflexionen der Quasiteilchen berücksichtigt werden. Die Quasiteilchen des Quasiteilchenpaares treffen sich bereits zum Zeitpunkt $T_k/2$ an der Position $L - x_0$. Ihre Positionen für $t < T_k$ sind gegeben durch

$$x_a(t) = (x_0 - |v_k|t) \bmod L, \quad (3.142a)$$

$$x_b(t) = (x_0 + |v_k|t) \bmod L. \quad (3.142b)$$

3.4.2 Semiklassische Theorie

In Abbildung 3.6 wurde für das betrachtete Quasiteilchenpaar und einen beliebigen Spin an der Position r der Kette bereits gekennzeichnet, ob die Quasiteilchen des Paares den Spin mit gerader oder ungerader Häufigkeit passiert haben. Dies ist entscheidend für die Berechnung des Beitrages eines Quasiteilchenpaares zur lokalen Magnetisierung eines Spins bzw. zur Korrelationsfunktion zwischen zwei Spins. Wie bereits erläutert wurde, können Quasiteilchen in der ferromagnetischen Phase mit sich mit Geschwindigkeit v_k ballistisch durch die Kette bewegendes Kinks identifiziert werden. In der Kette mit freien Randbedingungen sind sowohl gerade als auch ungerade Kinkzahlen möglich, wohingegen in der Kette mit periodischen Randbedingungen die Zahl der Kinks immer gerade ist. Wenn ein Quasiteilchen an einer Position der Kette passiert, wird der dortige Spin umgeklappt. Hat das Quasiteilchen den betrachteten Spin zu einem Zeitpunkt t mit gerader Häufigkeit passiert, leistet es somit keinen Beitrag, da sich der Spin wieder in seiner ursprünglichen Orientierung befindet. Auf diese Weise kann unter Berücksichtigung der an jeder Position



der Spinkette erzeugten Quasiteilchenpaare zu jeder Wellenzahl k die lokale Magnetisierung der Kette an der betrachteten Position bestimmt werden. Hierzu ist lediglich noch die Besetzungszahl f_k der Quasiteilchen nach dem Quench zu jeder Mode erforderlich. Vor der Herleitung von Ausdrücken für die f_k soll jedoch noch zunächst darauf eingegangen werden, wie Korrelationsfunktionen zweier Spins mithilfe der semiklassischen Theorie bestimmt werden können. Betrachtet werde hierzu die allgemeine Korrelationsfunktion zwischen zwei Spins an den Positionen r_1 und r_2 der Kette zu den Zeiten t_1 und t_2 gemäß (3.77). In Abbildung 3.7 ist der Beitrag dreier an verschiedenen Stellen der Kette durch den Quench erzeugter Quasiteilchenpaare zu verschiedenen Wellenzahlen zu der betrachteten Korrelationsfunktion illustriert. Während bei der Betrachtung der lokalen Magnetisierung lediglich zu berücksichtigen war, wie oft die Quasiteilchen die Position r des betrachteten Spins zum einem Zeitpunkt t passiert haben, d. h. die Anzahl der Schnittpunkte der Trajektorien mit der senkrechten Linie im Raum-Zeit-Diagramm zu bestimmen war, muss zur Berechnung der Korrelationsfunktion die Anzahl der Schnittpunkte der Trajektorien der Quasiteilchen mit der Verbindungsstrecke der beiden Punkte (r_1, t_1) und (r_2, t_2) , die die beiden Spins zu den betrachteten Zeitpunkten im Raum-Zeit-Diagramm beschreiben, bestimmt werden. In Abbildung 3.7 haben die Quasiteilchenpaare, deren Trajektorien im Raum-Zeit-Diagramm rot bzw. grün dargestellt sind, die Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$ jeweils zweimal geschnitten, führen also im Gegensatz zu dem Quasiteilchenpaar mit den blauen Trajektorien nicht zu einer Änderung der relativen Orientierung der beiden Spins zu den betrachteten Zeitpunkten. Somit leistet in der Abbildung nur das Quasiteilchenpaar mit den blauen Trajektorien einen Beitrag zur Korrelationsfunktion der beiden Spins.

Es verbleibt noch die Bestimmung der Verschränkungsentropie mithilfe der semiklassischen Theorie. Wie bereits bei der Beschreibung der Erzeugung der Quasiteilchen durch den Quench erläutert wurde, sind die beiden Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares verschränkt. Es werde wiederum ein Subsystem A der Länge ℓ betrachtet. Die restlichen Spins der Kette bilden das Subsystem B der Länge $L - \ell$. Der Beitrag eines Quasiteilchenpaares zur Verschränkungsentropie der Subsysteme A und B zu einem Zeitpunkt t ergibt sich aus den Positionen der Quasiteilchen des Paares innerhalb des Systems zu dem betrachteten Zeitpunkt. Befindet sich ein Quasiteilchen des Quasiteilchenpaares in Subsystem A und das andere in Subsystem B , so tragen sie aufgrund ihrer Verschränkung zur Verschränkungsentropie der beiden Subsysteme bei. Befinden sich hingegen beide Quasiteilchen des Paares im selben Subsystem, so leistet das Quasiteilchenpaar zu dem betrachteten Zeitpunkt keinen Beitrag zu Verschränkungsentropie. Dies ist in Abbildung 3.8 für ein Quasiteilchenpaar dargestellt.

3.4.3 Finite-Size-Effekte

Iglói und Rieger haben in [43] mithilfe der semiklassischen Theorie eine anschauliche Beschreibung des zeitlichen Verlaufs der lokalen Magnetisierung im eindimensionalen Ising-Modell nach einem globalen Quench gegeben. Diese kann aufgrund der analogen Beschreibung des Relaxationsprozesses mithilfe sich

wechselseitig frei mit konstanter Geschwindigkeit durch das System bewegender Quasiteilchen auch unmittelbar auf das transversale XY-Modell angewendet werden. Sie soll im Folgenden kurz wiedergegeben werden, bevor sich der quantitativen Beschreibung des Relaxationsprozesses des Systems nach dem Quench im Rahmen der semiklassischen Theorie zugewandt wird. Die Zeitentwicklung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion und der Verschränkungsentropie kann auf analoge Weise beschrieben werden. Betrachtet werde ein endliches System mit freien Randbedingungen. Aufgrund der endlichen Größe des Systems und der Reflexion der Quasiteilchen an den Kettenenden kann ein Quasiteilchen eine Position in der Kette mehrmals passieren. Betrachtet werden zunächst nur Quasiteilchen zu einer Wellenzahl k , die sich mit Geschwindigkeit v_k durch die Kette bewegen. Die an einer Position der Kette erzeugten Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares zur Wellenzahl k sind verschränkt, wohingegen an unterschiedlichen Positionen der Kette erzeugte Quasiteilchen inkohärent zueinander sind. Es zeigen sich drei Regime im zeitlichen Verlauf der lokalen Magnetisierung an der Position ℓ der Kette. Für $t < t_{k,\ell} = \ell/|v_k|$ passieren nur inkohärente Quasiteilchen die Position ℓ . Es ergibt sich ein exponentieller Abfall der lokalen Magnetisierung. Das Zeitintervall $t < t_{\ell,k}$ wird daher als *Regime freier Relaxation* bezeichnet. Sobald $t > t_{k,\ell}$ ist, haben für die ersten Quasiteilchenpaare beide Teilchen des Paares die Position ℓ passiert, sodass dieses Quasiteilchenpaar nun keinen Beitrag mehr zur lokalen Magnetisierung leistet. Bei den bis zur Zeit $T_k = L/|v_k|$ an der Position ℓ eintreffenden Quasiteilchen handelt es sich im gleichen Maße um Quasiteilchen, für die das an der gleichen Position der Kette erzeugte Quasiteilchen des Quasiteilchenpaares die Position ℓ bereits zu einem früheren Zeitpunkt passiert hat, und solche Quasiteilchen, die die ersten ihres Paares sind, die die Position ℓ passieren. Aus diesem Grund heben sich die Beiträge der im Zeitintervall $t_{k,\ell} < t < T_k - t_{k,\ell}$ die Position ℓ der Spinkette erreichenden Quasiteilchen gerade gegenseitig auf, sodass der Wert der lokalen Magnetisierung über das besagte Zeitintervall hinweg auf seinem Wert vom Zeitpunkt $t_{k,\ell}$ verbleibt. Das Zeitintervall wird aus diesem Grund als *quasistationäres Regime* bezeichnet. Für $T_k - t_{k,\ell} < t < T_k$ treffen nur noch Quasiteilchen an der Position ℓ der Spinkette ein, für die das andere Quasiteilchen des Quasiteilchenpaares die Position ℓ bereits zu einem früheren Zeitpunkt passiert hat. Hierdurch werden die inkohärenten Spinumklapps zu früheren Zeiten rückgängig gemacht und es ergibt sich ein exponentieller Wiederanstieg der lokalen Magnetisierung. Das Zeitintervall $T_k - t_{k,\ell} < t < T_k$ wird daher als *Wiederherstellungsregime* bezeichnet. Die Dauer des quasistationären Regimes ist von der Wahl der betrachteten Position ℓ innerhalb der Kette abhängig. Das quasistationäre Regime ist umso ausgeprägter, je näher ℓ am Rand der Kette liegt. Für $\ell = L/2$ verschwindet das quasistationäre Regime vollständig und es besteht ein direkter Übergang vom exponentiellen Abfall im Regime freier Relaxation zum exponentiellen Wiederanstieg der lokalen Magnetisierung im Wiederherstellungsregime.

In der obigen Beschreibung des zeitlichen Verlaufs der lokalen Magnetisierung wurden nur Quasiteilchen zu einer Wellenzahl k berücksichtigt. Wären die Quasiteilchen wirklich monodispers, so ergäbe sich somit eine perfekte Periodizität des zeitlichen Verlaufs der lokalen Magnetisierung mit Periodendauer T_k . Wie bereits gezeigt wurde, werden durch den Quench jedoch zu jeder Wellenzahl k an jeder Position der Kette Quasiteilchenpaare erzeugt, die sich mit Geschwindigkeit $|v_k|$ durch das System bewegen. Hierdurch ergeben sich Abweichungen von dem oben beschriebenen Verlauf. Streng betrachtet besteht eine Periodizität des Systems nur noch mit einer Periodendauer, die dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen aller Zeiten T_k entspricht, die die Quasiteilchen zu allen erlaubten Wellenzahlen k benötigen, um einmal durch das System zu laufen. Effektiv ergibt sich jedoch eine Quasiperiodizität des Systems, welche durch das Maximum v_{\max} der Geschwindigkeiten aller Quasiteilchen bestimmt wird. Die Periodendauer der Quasiperiodizität beträgt somit $T_{\text{period}}^{\text{mag}} = L/v_{\max}$. Abweichungen von einer exakten Periodizität mit $T_{\text{period}}^{\text{mag}}$ ergeben sich durch die unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Quasiteilchen und bestehen zum einen darin, dass im quasistationären Regime die lokale Magnetisierung nicht konstant bleibt, sondern weiterhin einen Abfall zeigt. Dieser wird durch die Quasiteilchen mit $|v_k| < v_{\max}$ hervorgerufen, für die $T_k > L/v_{\max}$ ist. Der Abfall der lokalen Magnetisierung im quasistationären Regime ist jedoch bedeutend kleiner als im Regime freier Relaxation. Weiterhin erreicht die lokale Magnetisierung nach $T_{\text{period}}^{\text{mag}}$ nicht wieder exakt ihren Anfangswert zum Zeitpunkt $t = 0$, da bedingt durch die sich schneller bewegenden Quasiteilchen ein neuerlicher Abfall einsetzt, bevor die lokale Magnetisierung durch die sich langsamer bewegenden Quasiteilchen vollständig wiederhergestellt wurde.

Im Falle periodischer Randbedingungen ist die lokale Magnetisierung von der betrachteten Position innerhalb der Kette unabhängig. Weiterhin existiert kein quasistationäres Regime. Die Periodendauer für die Beiträge der Quasiteilchen zur Wellenzahl k ist wie im Falle freier Randbedingungen T_k und die Quasiperiodizität der lokalen Magnetisierung ist ebenfalls gegeben durch $T_{\text{period}}^{\text{mag}} = L/v_{\max}$.

3.4.4 Besetzungszahl der Quasiteilchen

Nachdem die Grundidee zur Bestimmung der Observablen mithilfe der semiklassischen Theorie erläutert und eine anschauliche Beschreibung der Vorgänge im System gegeben wurde, gilt es nun, all dies in Formeln zu fassen, die Anzahl und Bewegung aller durch den Quench erzeugten Quasiteilchenpaare berücksichtigen und so die quantitative Beschreibung der Zeitentwicklung der lokalen Magnetisierung, der gleichzeitigen Korrelationsfunktion sowie der Verschränkungsentropie erlauben. Hierzu wird neben der bereits erläuterten Bestimmung der Geschwindigkeit der Quasiteilchen und ihrer Propagation durch das System ihre Besetzungszahl f_k nach dem Quench von entscheidender Bedeutung sein. Im Gegensatz zur Geschwindigkeit v_k der Quasiteilchen, welche nur von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench abhängt, werden die f_k sowohl von dem initialen als auch von dem finalen Hamiltonoperator abhängen. Das System mit periodischen Randbedingungen ist translationsinvariant und die Erzeugung der Quasiteilchen durch die betrachteten globalen Quenchs erfolgt homogen entlang der Kette. Im Falle freier Randbedingungen hingegen ergeben sich insbesondere in der Nähe der Kettenenden Abweichungen, die jedoch bei hinreichend großer Kettenlänge vernachlässigt werden können. Da das System bei $T = 0$ betrachtet wird, erfolgt die Erzeugung der Quasiteilchen ausschließlich durch den Quench und die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Quench ist durch den Erwartungswert des Teilchenzahloperators $\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k$ der freien Fermionen nach dem Quench im Anfangszustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des Systems gegeben [41]:

$$f_k = \langle \Psi_0^{(0)} | \hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.143)$$

Die Besetzungszahl der Quasiteilchen ist unter der Zeitentwicklung des Systems erhalten, da der Hamiltonoperator mit dem Teilchenzahloperator $\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k$ jeder Mode kommutiert. Zur Bestimmung des Erwartungswertes in (3.143) müssen die Fermioperatoren $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ in Termen der Fermioperatoren $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$ dargestellt werden, in denen der Hamiltonoperator vor dem Quench diagonal ist und deren Wirkung auf seinen Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ daher bekannt ist.

Für das Modell mit freien Randbedingungen werden zu diesem Zweck die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ zunächst gemäß (3.18) über die \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i ausgedrückt und diese anschließend gemäß (3.22) über die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$. Es ergibt sich

$$\hat{\eta}_k^\dagger = \frac{1}{2} \left[\sum_{i,k'} \left\{ \left(\phi_k(i) \phi_{k'}^{(0)}(i) + \psi_k(i) \psi_{k'}^{(0)}(i) \right) \hat{\eta}_{k'}^{(0)\dagger} + \left(\phi_k(i) \phi_{k'}^{(0)}(i) - \psi_k(i) \psi_{k'}^{(0)}(i) \right) \hat{\eta}_{k'}^{(0)} \right\} \right] , \quad (3.144a)$$

$$\hat{\eta}_k = \frac{1}{2} \left[\sum_{i,k'} \left\{ \left(\phi_k(i) \phi_{k'}^{(0)}(i) + \psi_k(i) \psi_{k'}^{(0)}(i) \right) \hat{\eta}_{k'}^{(0)} + \left(\phi_k(i) \phi_{k'}^{(0)}(i) - \psi_k(i) \psi_{k'}^{(0)}(i) \right) \hat{\eta}_{k'}^{(0)\dagger} \right\} \right] \quad (3.144b)$$

und damit für die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Quench

$$f_k = \frac{1}{2} \left[1 - \sum_{i,j,k'} \phi_k(i) \psi_k(j) \phi_{k'}^{(0)}(i) \psi_{k'}^{(0)}(j) \right] . \quad (3.145)$$

Die ϕ_k und ψ_k sind dabei die Eigenvektoren der Matrizen $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})$ bzw. $(\mathbf{A} + \mathbf{B})(\mathbf{A} - \mathbf{B})$ für den Hamiltonoperator \hat{H} nach dem Quench zum Eigenwert Λ_k^2 gemäß (3.21a) bzw. (3.21b), die $\phi_k^{(0)}$ und $\psi_k^{(0)}$ die entsprechenden Vektoren für den Hamiltonoperator \hat{H}_0 vor dem Quench. Sowohl ϕ_k und ψ_k als auch $\phi_k^{(0)}$ und $\psi_k^{(0)}$ müssen numerisch bestimmt werden.

Im Gegensatz dazu ist die Berechnung der f_k für das System mit periodischen Randbedingungen analytisch möglich. Die Quenchparameter gehen hierbei unmittelbar in die Ausdrücke für die Besetzungszahlen f_k ein. Zunächst müssen wiederum die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ über die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$ ausgedrückt werden. Dies erfolgt mithilfe der inversen Bogoliubov-Rotation (3.53) von den $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ zu den \hat{c}_k^\dagger und \hat{c}_k , welche im Anschluss daran durch die Bogoliubov-Rotation (3.51) in die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$ überführt werden. Es ergeben sich folgende Ausdrücke für die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$:

$$\hat{\eta}_k^\dagger = \mathcal{U}_k \hat{\eta}_k^{(0)\dagger} + \mathcal{V}_k \hat{\eta}_{-k}^{(0)} , \quad (3.146a)$$

$$\hat{\eta}_k = \mathcal{U}_k \hat{\eta}_k^{(0)} - \mathcal{V}_k \hat{\eta}_{-k}^{(0)\dagger} \quad (3.146b)$$

mit

$$\mathcal{U}_k = u_k u_k^{(0)} - v_k v_k^{(0)}, \quad (3.147a)$$

$$\mathcal{V}_k = -w_k v_k^{(0)} + v_k u_k^{(0)}. \quad (3.147b)$$

Dabei ist $\mathcal{U}_k = \mathcal{U}_k^*$ und $\mathcal{V}_k = \mathcal{V}_k^*$. Für die Besetzungszahlen f_k der Quasiteilchen folgt damit

$$f_k = \mathcal{V}_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(h - J \cos(k))(h_0 - J_0 \cos(k)) + J J_0 \gamma \gamma_0 \sin^2(k)}{\Lambda_k \Lambda_k^{(0)}} \right]. \quad (3.148)$$

Ausgedrückt über die Bogoliubov-Winkel θ_k und $\theta_k^{(0)}$ mithilfe von (3.58) zeigt sich, dass die \mathcal{U}_k und die \mathcal{V}_k durch die Differenz $\Delta_k = \theta_k - \theta_k^{(0)}$ der Bogoliubov-Winkel bestimmt sind:

$$\mathcal{U}_k = \cos\left(\frac{\Delta_k}{2}\right), \quad (3.149a)$$

$$\mathcal{V}_k = \sin\left(\frac{\Delta_k}{2}\right). \quad (3.149b)$$

Für die Besetzungszahlen f_k ergibt sich damit

$$f_k = \sin^2\left(\frac{\Delta_k}{2}\right) = \frac{1}{2} [1 - \cos(\Delta_k)]. \quad (3.150)$$

Hieraus folgt unmittelbar $0 \leq f_k \leq 1$. Weiterhin zeigt ein Vergleich von (3.150) zu (3.148)

$$\cos(\Delta_k) = \frac{(h - J \cos(k))(h_0 - J_0 \cos(k)) + J J_0 \gamma \gamma_0 \sin^2(k)}{\Lambda_k \Lambda_k^{(0)}}. \quad (3.151)$$

Anhand obiger Formel für f_k wird ersichtlich, dass die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Quench im Gegensatz zu ihrer Energie Λ_k und ihrer Geschwindigkeit v_k nicht nur vom Hamiltonoperator \hat{H} nach dem Quench abhängt, sondern eine Funktion der Parameter sowohl des Hamiltonoperators \hat{H}_0 vor dem Quench als auch des Hamiltonoperators \hat{H} nach dem Quench darstellt, also vom gesamten Quenchprotokoll bestimmt wird. Hierbei erweist sich die Besetzungszahl der Quasiteilchen jedoch als invariant gegenüber einer Umkehr des Quenchprotokolls, d. h. einer Vertauschung von \hat{H}_0 und \hat{H} .

Da sich für hinreichend große Systeme die Besetzungszahlen der Quasiteilchen zwischen Ketten mit freien und mit periodischen Randbedingungen nahezu nicht unterscheiden, wird im weiteren Verlauf der Dissertation obige Formel für die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach einem Quench auch für Systeme mit freien Randbedingungen verwendet werden.

3.4.5 Berechnung der Observablen

Nachdem die Besetzungszahlen der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie bekannt sind, können nun Ausdrücke für die Zeitentwicklung der Observablen bestimmt werden. Die Herleitung der Formeln zur Berechnung der lokalen Magnetisierung und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion erfolgt dabei gemäß [45] ausgehend von der allgemeinen Korrelationsfunktion zweier Spins an den Positionen r_1 und r_2 der Kette zu beliebigen Zeitpunkten t_1 und t_2 wie in Abbildung 3.7 dargestellt. In den Erläuterungen zu der Abbildung wurde bereits erwähnt, dass der Beitrag eines Quasiteilchenpaares zu der Korrelationsfunktion der beiden Spins bestimmt wird durch die Anzahl der Schnittpunkte ihrer Trajektorien im Raum-Zeit-Diagramm mit der Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$. Ein Beitrag des Quasiteilchenpaares zur Korrelationsfunktion besteht nur dann, wenn die Anzahl der Schnittpunkte ungerade ist. Bezeichne $Q(r_1, t_1; r_2, t_2)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Trajektorien der Quasiteilchen, die an derselben Position der Spinkette erzeugt wurden, insgesamt eine ungerade Anzahl an Schnittpunkten mit der Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$ aufweisen. Zur Bestimmung der Korrelationsfunktion müssen die an allen Positionen der Kette erzeugten Quasiteilchenpaare betrachtet werden. Hierbei beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass die Trajektorien der Quasiteilchenpaare von genau n Positionen der Kette die Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$ mit ungerader Häufigkeit geschnitten haben, $Q^n(1-Q)^{L-n}$. Die Korrelationsfunktion ergibt sich dann durch Summation über alle möglichen Werte von n :

$$\frac{C^{xx}(r_1, t_1; r_2, t_2)}{C_{\text{eq}}^{xx}(r_1; r_2)} = \sum_{n=0}^L (-1)^n Q^n (1-Q)^{L-n} \frac{L!}{n!(L-n)!} = (1-2Q)^L \approx e^{-2Q(r_1, t_1; r_2, t_2)L}. \quad (3.152)$$

Hierbei bezeichnet $C_{\text{eq}}^{xx}(r_1; r_2)$ die Gleichgewichtskorrelationsfunktion der beiden betrachteten Spins der Kette vor dem Quench. In der Näherung im letzten Schritt wurde genutzt, dass $Q(r_1, t_1; r_2, t_2)$ klein ist. Bei der Bestimmung von Q ist über alle Wellenzahlen k zu mitteln. Diese liegen für das Modell mit freien Randbedingungen im Intervall von 0 bis π . Q kann somit geschrieben werden in der Form

$$Q(r_1, t_1; r_2, t_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk f_k q_k(r_1, t_1; r_2, t_2). \quad (3.153)$$

f_k bezeichnet dabei die im vorherigen Abschnitt hergeleitete Besetzungszahl der Quasiteilchen zur Wellenzahl k nach dem Quench und $q_k(r_1, t_1; r_2, t_2)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Trajektorien der Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k die Verbindungslinie $(r_1, t_1; r_2, t_2)$ insgesamt mit einer ungeraden Häufigkeit schneiden. Sollen nur die Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k betrachtet werden, die an der Position x_0 erzeugt wurden, so wird die Bezeichnung $q_k(x_0|r_1, t_1; r_2, t_2)$ verwendet. Unter der Annahme, dass die Quasiteilchen durch den Quench homogen entlang der Kette erzeugt werden, ergibt sich $q_k(r_1, t_1; r_2, t_2)$ aus den $q_k(x_0|r_1, t_1; r_2, t_2)$ zu

$$q_k(r_1, t_1; r_2, t_2) = \frac{1}{L} \int_0^L dx_0 q_k(x_0|r_1, t_1; r_2, t_2). \quad (3.154)$$

Das weitere Vorgehen unterscheidet sich nun in Abhängigkeit von der jeweiligen Observablen.

Lokale Magnetisierung

Für die lokale Magnetisierung ist $r_1 = r_2 = \ell$ sowie $t_1 = 0$ und $t_2 = t$. Hieraus ergibt sich für die Zeitentwicklung von m_ℓ^x im Rahmen der semiklassischen Theorie

$$m_\ell^x(t) = m_{\text{eq},\ell}^x \exp \{ -2q^{\text{mag}}(\ell, t) L \}. \quad (3.155)$$

Dabei ist $m_{\text{eq},\ell}^x$ die lokale Magnetisierung im Gleichgewicht vor dem Quench und

$$q^{\text{mag}}(\ell, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk f_k q_k^{\text{mag}}(\ell, t) \quad (3.156)$$

mit

$$q_k^{\text{mag}}(\ell, t) = \frac{1}{L} \int_0^L dx_0 q_k^{\text{mag}}(x_0|\ell, t). \quad (3.157)$$

Für die weiteren Überlegungen sei zunächst $\ell \leq L/2$ und $t \leq T_k/2 = L/2|v_k|$. Für das betrachtete Zeitintervall bezeichnet $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ gerade den Anteil der Positionen innerhalb der Spinkette, für die an ihnen erzeugte Quasiteilchen eines Paares zur Wellenzahl k mit Geschwindigkeit v_k bzw. $-v_k$ die Position ℓ genau einmal passiert haben, d. h. den Spin an der Position ℓ genau einmal umgeklappt haben. In Abbildung 3.9 sind die Positionen der Spinkette, für die die an ihnen erzeugten Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k zum Zeitpunkt t mit $0 \leq t \leq T_k/2$ einen Beitrag zur lokalen Magnetisierung an der Position ℓ leisten, graphisch dargestellt. Insgesamt ergibt sich für das Zeitintervall $t \in [0, T_k/2]$

$$q_k^{\text{mag}}(\ell, t) = \begin{cases} 2|v_k|t/L & \text{für } 0 \leq t \leq \ell/|v_k| \\ 2\ell/L & \text{für } \ell/|v_k| \leq t \leq T_k/2 \end{cases} \quad (3.158)$$

Wie Abbildung 3.6 (a) entnommen werden kann, ist die Bewegung der Quasiteilchen periodisch. Im Falle freier Randbedingungen beträgt die Periodendauer der Bewegung $2T_k$. Die Positionen und Geschwindigkeiten der Quasiteilchen zur Wellenzahl k sind jedoch bereits nach der Zeit T_k spiegelsymmetrisch bzgl. ihrer Anfangskonfiguration. Hieraus ergibt sich eine Periodizität von $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ mit Periodendauer T_k :

$$q_k^{\text{mag}}(\ell, t + nT_k) = q_k^{\text{mag}}(\ell, t), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.159)$$

Da die Quasiteilchen an jeder Position der Kette zu jeder Wellenzahl k paarweise mit entgegengesetzten Geschwindigkeiten v_k und $-v_k$ erzeugt werden, ist $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ weiterhin invariant unter Zeitumkehr, da

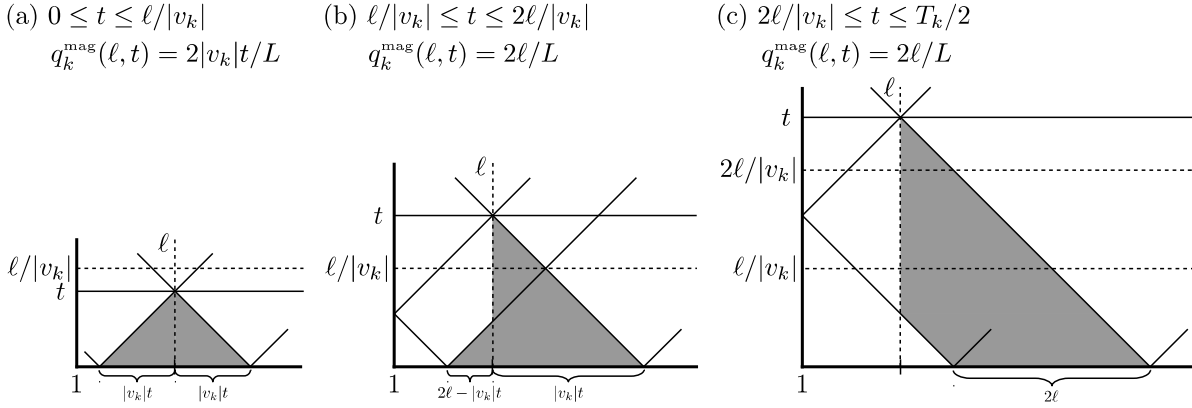


Abbildung 3.9: Graphische Darstellung des Anteils $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ der Positionen der Spinkette, für die die an ihnen erzeugten Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k zum Zeitpunkt t mit $0 \leq t \leq T_k/2$ einen Beitrag zur lokalen Magnetisierung an der Position ℓ leisten. Es wird das System mit freien Randbedingungen betrachtet. Die Abbildung wurde [45] nachempfunden.

dies gerade der Umkehr der Geschwindigkeiten entspricht. Somit gilt $q_k^{\text{mag}}(\ell, T_k - t) = q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$. Auf dem Zeitintervall $t \in [0, T_k]$ ergibt sich dann

$$q_k^{\text{mag}}(\ell, t) = \begin{cases} 2|v_k|t/L & \text{für } 0 \leq t \leq \ell/|v_k| \\ 2\ell/L & \text{für } \ell/|v_k| \leq t \leq T_k - \ell/|v_k| \\ 2 - 2|v_k|t/L & \text{für } T_k - \ell/|v_k| \leq t \leq T_k \end{cases} . \quad (3.160)$$

Für $\ell \geq L/2$ kann die räumliche Symmetrie $q_k^{\text{mag}}(\ell, t) = q_k^{\text{mag}}(L - \ell, t)$ genutzt werden und für Zeiten $t \geq T_k$ die Periodizität von $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ gemäss (3.159). Hierbei ist zu beachten, dass lediglich der zeitliche Verlauf der $q_k^{\text{mag}}(\ell, t)$ für jede Wellenzahl k periodisch ist. $q^{\text{mag}}(\ell, t)$ hingegen ist aufgrund der unterschiedlichen Geschwindigkeiten und der damit einhergehenden unterschiedlichen Periodendauern der Quasiteilchen zu verschiedenen k nicht periodisch³. Es ergibt sich jedoch eine Quasiperiodizität von $q^{\text{mag}}(\ell, t)$, die durch die Maximalgeschwindigkeit v_{max} der Quasiteilchen bestimmt ist mit Periodendauer $T_{\text{period}}^{\text{mag,FRB}} = L/v_{\text{max}}$. Im thermodynamische Limes verschwindet diese Quasiperiodizität und es ergibt sich

$$m_\ell^x(t) = m_{\text{eq},\ell}^x \exp \left\{ -2t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \theta(\ell - |v_k|t) - 2\ell \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k \theta(|v_k|t - \ell) \right\} . \quad (3.161)$$

Hieraus folgt für Relaxationszeit

$$\tau_{\text{mag}} = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \right]^{-1} \quad (3.162)$$

und für die Korrelationslänge

$$\xi_{\text{mag}} = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k \right]^{-1} . \quad (3.163)$$

Eine genauere Betrachtung des Ausdrucks für die Korrelationslänge zeigt, dass sie nur durch die Besetzungszahl f_k der Quasiteilchen nach dem Quench bestimmt ist. Quenchprotokolle, die gleiche Besetzungszahlen der Quasiteilchen erzeugen, führen somit zu der gleichen Korrelationslänge unabhängig von den Parametern des Hamiltonoperators vor und des Hamiltonoperators nach dem Quench. Für die Relaxationszeit hingegen besteht eine Abhängigkeit von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench durch die auftretenden Geschwindigkeiten der Quasiteilchen. Somit führen nur solche Quenches zur gleichen Relaxationszeit, die gleiche Besetzungszahlen der Quasiteilchen erzeugen und am selben

³Natürlich ist $q^{\text{mag}}(\ell, t)$ für ein endlich großes System periodisch. Nach einer Zeitspanne, die dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen der T_k entspricht, befindet sich das System in jedem Fall wieder in der gleichen Konfiguration wie zum Zeitpunkt $t = 0$, jedoch ist diese Zeitspanne viel größer als die simulierte Zeit.

Punkt des Phasendiagramms enden.

Für das System mit periodischen Randbedingungen sind die Ergebnisse unabhängig von der Position des betrachteten Spins innerhalb der Kette und es ist

$$q_k^{\text{mag}}(t) = \begin{cases} 2|v_k|t/L & \text{für } 0 \leq t \leq T_k/2 \\ 2 - 2|v_k|t/L & \text{für } T_k/2 \leq t \leq T_k \end{cases} . \quad (3.164)$$

$q_k^{\text{mag}}(t)$ weist wie im Falle freier Randbedingungen eine Periodizität mit T_k auf, die Periodendauer stimmt also hier mit der Periodendauer der Bewegung der Quasiteilchen nach Abbildung 3.6 (b) überein. Gleiches gilt für die Periodendauer der Quasiperiodizität, die wiederum durch $T_{\text{period}}^{\text{mag,PRB}} = L/v_{\text{max}}$ gegeben ist. Im thermodynamischen Limes ergibt sich für das System mit periodischen Randbedingungen ein rein exponentieller Abfall der lokalen Magnetisierung, der von der Relaxationszeit τ_{mag} bestimmt wird:

$$m^x(t) = m_{\text{eq}}^x \exp \left\{ -2t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \right\} = m_{\text{eq}}^x \exp \left\{ -t/\tau_{\text{mag}} \right\} . \quad (3.165)$$

Gleichzeitige Korrelationsfunktion

Zur Bestimmung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins an den Positionen r_1 und r_2 der Spinkette ist in dem Ausdruck (3.152) für die allgemeine Korrelationsfunktion $t_1 = t_2 = t$ zu setzen. Da das System mit freien Randbedingungen betrachtet wird, wird bei der Bestimmung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins im Abstand r zur Minimierung von Randeffekten $r_1 = (L - r)/2$ und $r_2 = (L + r)/2$ gesetzt, die betrachteten Positionen also symmetrisch zur Mitte der Kette gewählt. Diese Korrelationsfunktion zweier Spins im Innern der Kette wird als Bulk-Korrelationsfunktion bezeichnet. Im Folgenden wird für sie die Notation

$$C^{xx}((L - r)/2, t; (L + r)/2, t) := C_{\text{bulk}}^{xx}(r, t) \quad (3.166)$$

verwendet. Der Ausdruck der semiklassischen Theorie für die gleichzeitige Korrelationsfunktion kann damit geschrieben werden als

$$C_{\text{bulk}}^{xx}(r, t) = C_{\text{eq,bulk}}^{xx}(r) \exp \left\{ -L \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k q_k^{\text{bulk}}(r, t) \right\} . \quad (3.167)$$

Wie für die lokale Magnetisierung kann $q_k^{\text{bulk}}(r, t)$ mithilfe graphischer Überlegungen bestimmt werden. Diese sind in Abbildung 3.10 dargestellt. Wie Abbildung 3.10 (a) entnommen werden kann, ist $q_k^{\text{bulk}}(r, t)$ aufgrund der homogenen Erzeugung der Quasiteilchenpaare entlang der Kette und der symmetrischen Anordnung der beiden betrachteten Spins zur Kettenmitte periodisch mit Periodendauer $T_k/2$, d. h.

$$q_k^{\text{bulk}}(r, t + nT_k/2) = q_k^{\text{bulk}}(r, t) , \quad n \in \mathbb{N} . \quad (3.168)$$

Aus Abbildung 3.10 (b) und (c) ergibt sich dann unter Ausnutzung dieser Periodizität und der Invarianz unter Zeitumkehr

$$q_k^{\text{bulk}}(r, t) = \begin{cases} 4v_k t/L & \text{für } 0 \leq t \leq r/2|v_k| \\ 2r/L & \text{für } r/2|v_k| \leq t \leq T_k/2 - r/2|v_k| \\ 2 - 4v_k t/L & \text{für } T_k/2 - r/2|v_k| \leq t \leq T_k/2 \end{cases} . \quad (3.169)$$

Für $r > L/2$ ist in den obigen Ausdrücken r durch $L - r$ zu ersetzen. Die gleichzeitige Korrelationsfunktion weist wie die lokale Magnetisierung eine Quasiperiodizität auf, jedoch beträgt ihre Periodendauer $T_{\text{period}}^{\text{bulk}} = L/2v_{\text{max}} = T_{\text{period}}^{\text{mag}}/2$. Wie für die lokale Magnetisierung verschwindet im thermodynamischen Limes die Quasiperiodizität und die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Bulk-Spins ist gegeben durch

$$C_{\text{bulk}}^{xx}(r, t) = C_{\text{eq,bulk}}^{xx}(r) \exp \left\{ -4t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \theta(r - 2|v_k|t) - 2r \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \theta(2|v_k|t - r) \right\} . \quad (3.170)$$

Hieraus ergibt sich die Relaxationszeit der gleichzeitigen Korrelationsfunktion

$$\tau_{\text{corr}} = \left[4 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \right]^{-1} \quad (3.171)$$

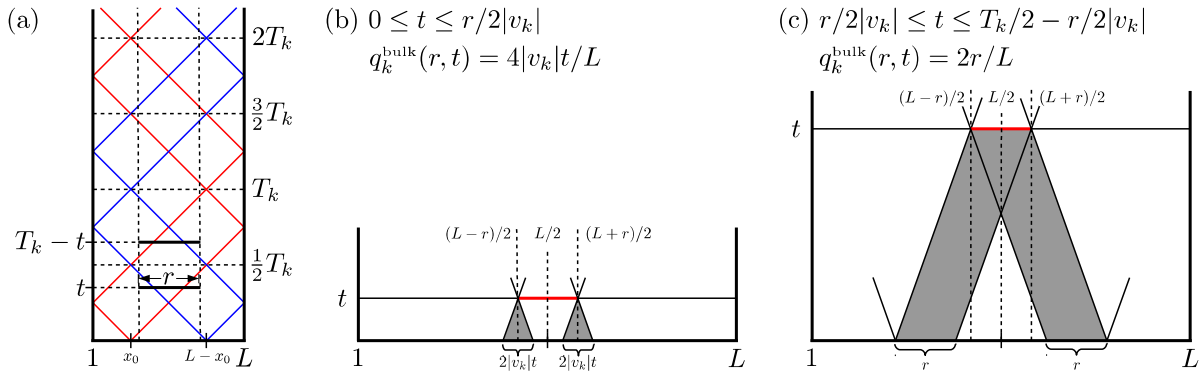


Abbildung 3.10: Graphische Darstellung zur Bestimmung von $q_k^{\text{bulk}}(r, t)$. (a) Bewegung zweier an Positionen symmetrisch zur Kettenmitte erzeugter Quasiteilchenpaare zur selben Wellenzahl k durch das System mit freien Randbedingungen. Aufgrund der symmetrischen Lage der beiden betrachteten Spins ergibt sich eine gegenüber der lokalen Magnetisierung halbierte Periodendauer von $T_k/2$ für $q_k^{\text{bulk}}(r, t)$. (b) und (c) Graphische Darstellung des Anteils $q_k^{\text{bulk}}(r, t)$ der Positionen der Spinkette, für die die an ihnen erzeugten Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k zu Zeiten $0 \leq t \leq r/2|v_k|$ bzw. $r/2|v_k| \leq t \leq T_k/2 - r/2|v_k|$ einen Beitrag zur Bulk-Korrelationsfunktion zweier Spins im Abstand r leisten. Die Abbildung wurde [45] nachempfunden.

und die Korrelationslänge der gleichzeitigen Korrelationsfunktion

$$\xi_{\text{corr}} = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k \right]^{-1}. \quad (3.172)$$

Während die Korrelationslänge für die gleichzeitige Korrelationsfunktion mit derjenigen für die lokale Magnetisierung übereinstimmt, ist die Relaxationszeit nur halb so lang:

$$\xi_{\text{corr}} = \xi_{\text{mag}}, \quad (3.173)$$

$$\tau_{\text{corr}} = \tau_{\text{mag}}/2. \quad (3.174)$$

Neben der Bulk-Korrelationsfunktion kann auch die gleichzeitige Korrelationsfunktion eines Randspins mit einem Spin im Innern der Kette betrachtet werden. Diese wird als Surface-to-Bulk-Korrelationsfunktion bezeichnet. Zu ihrer Berechnung wird $r_1 = 1$ und $r_2 = r$ gesetzt:

$$C_{\text{surf}}^{\text{xx}}(r, t) := C^{\text{xx}}(1, t; r, t) \quad (3.175)$$

Analoge Überlegungen wie oben führen zu

$$C_{\text{surf}}^{\text{xx}}(r, t) = C_{\text{eq, surf}}^{\text{xx}}(r) \exp \left\{ -L \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k q_k^{\text{surf}}(r, t) \right\} \quad (3.176)$$

mit

$$q_k^{\text{surf}}(r, t) = \begin{cases} 2|v_k|t/L & \text{für } 0 \leq t \leq r/|v_k| \\ 2r/L & \text{für } r/|v_k| \leq t \leq T_k - r/|v_k| \\ 2 - 2|v_k|t/L & \text{für } T_k - r/|v_k| \leq t \leq T_k \end{cases}. \quad (3.177)$$

Diese Ausdrücke stimmen mit denjenigen für die lokale Magnetisierung überein, nur dass die betrachtete Position ℓ für die lokale Magnetisierung durch den Abstand r der beiden Spins ersetzt werden muss. Insbesondere ist $q_k^{\text{surf}}(r, t)$ periodisch mit Periodendauer $2T_k$ und die Surface-Bulk-Korrelationsfunktion quasiperiodisch mit Periodendauer $T_{\text{period}}^{\text{surf}} = L/v_{\text{max}} = 2T_{\text{period}}^{\text{bulk}}$.

Im Falle periodischer Randbedingungen ist nicht zwischen Bulk- und Surface-to-Bulk-Korrelationsfunktion zu unterscheiden und die gleichzeitige Korrelationsfunktion ist nur vom Abstand r der beiden betrachteten Spins der Kette abhängig. Die oben hergeleiteten Formeln für die Bulk-Korrelationsfunktion

für das Modell mit freien Randbedingungen können aufgrund der symmetrischen Anordnung der beiden Spins zur Kettenmitte unmittelbar auf das System mit periodischen Randbedingungen übertragen werden. Lediglich der Vorfaktor, der die gleichzeitige Korrelationsfunktion im Gleichgewicht vor dem Quench misst, ist abzuändern. Es ergibt sich somit

$$C^{xx}(r, t) = C_{\text{eq}}^{xx}(r) \exp \left\{ -L \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k q_k(r, t) \right\} \quad (3.178)$$

mit $q_k(r, t) = q_k^{\text{bulk}}(r, t)$ und die Periodendauer der Quasiperiodizität ist gegeben durch $L/2v_{\text{max}}$. Für hinreichend große Kettenlängen und im Falle freier Randbedingungen einen hinreichend großen Abstand von den Kettenenden ist der Einfluss der Randbedingungen auf die Gleichgewichtskorrelationsfunktion vernachlässigbar und die Vorfaktoren für die Bulk-Korrelationsfunktion und die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins der Kette mit periodischen Randbedingungen stimmen überein. Im thermodynamischen Limes ist

$$C^{xx}(r, t) = C_{\text{eq}}^{xx}(r) \exp \left\{ -4t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \theta(r - 2|v_k|t) - 2r \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| f_k \theta(2|v_k|t - r) \right\}. \quad (3.179)$$

Verschränkungsentropie

Die Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares sind verschränkt. Befindet sich eines von ihnen in Subsystem A und das andere in Subsystem B , so leistet das Quasiteilchenpaar einen durch die Binärentropie

$$s_k = -(1 - f_k) \ln(1 - f_k) - f_k \ln(f_k) \quad (3.180)$$

gegebenen Beitrag zur Verschränkungsentropie der beiden Subsysteme. Befinden sich beide Quasiteilchen hingegen im selben Subsystem der Spinkette, so trägt das betrachtete Quasiteilchenpaar nicht zur Verschränkungsentropie bei. Insgesamt ergibt sich in der semiklassischen Theorie folgender Ausdruck für die Verschränkungsentropie eines Subsystems der Länge ℓ mit dem Rest der Kette:

$$S_\ell(t) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} s_k q_k^{\text{ent}}(\ell, t). \quad (3.181)$$

$q_k^{\text{ent}}(\ell, t)$ bezeichnet hierbei den Anteil der Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k , die zum Zeitpunkt t einen Beitrag zur Verschränkungsentropie leisten. Er ergibt sich durch Mittelung über die Beiträge der an jeder Position des Systems durch den Quench erzeugten Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k gemäß:

$$q_k^{\text{ent}}(\ell, t) = \frac{1}{L} \int_0^L dx_0 q_k^{\text{ent}}(x_0|\ell, t). \quad (3.182)$$

Hierbei ist $q_k^{\text{ent}}(x_0|\ell, t) = 1$, falls das an Position x_0 erzeugte Quasiteilchenpaar zur Zeit t einen Beitrag zur Verschränkungsentropie der beiden Subsysteme leistet, sich also ein Quasiteilchen des Paares in Subsystem A und das andere in Subsystem B befindet, und $q_k^{\text{ent}}(x_0|\ell, t) = 0$ andernfalls. Es gilt nun für die Quasiteilchenpaare zu jeder Wellenzahl k , deren Quasiteilchen sich infolgedessen mit Geschwindigkeit v_k bzw. $-v_k$ durch das System bewegen, in Abhängigkeit von der Position x_0 ihrer Erzeugung die Zeitintervalle zu bestimmen, während derer sie zur Verschränkungsentropie beitragen.

Für das Modell mit freien Randbedingungen sind in Bezug auf x_0 die drei Bereiche $0 \leq x_0 \leq \ell$, $\ell \leq x_0 \leq L - \ell$ und $L - \ell \leq x_0 \leq L$ der Spinkette zu unterscheiden. In Abbildung 3.11 sind für jeweils ein x_0 aus jedem der drei Bereiche für ein k die Trajektorien des zugehörigen Quasiteilchenpaares dargestellt. Aus der Abbildung wird ersichtlich, dass der Beitrag des Quasiteilchenpaares zur Wellenzahl k periodisch ist mit Periodendauer $2T_k$ und dass innerhalb einer Periode zwei Zeitintervalle existieren, während derer der Beitrag besteht. Diese Zeitintervalle werden mit $I_k^{\text{FRB}}(x_0) = [t_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0), t_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0)] \subseteq [0, T_k]$ und $\tilde{I}_k^{\text{FRB}}(x_0) = [\tilde{t}_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0), \tilde{t}_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0)] \subseteq [T_k, 2T_k]$ bezeichnet, sodass

$$q_k^{\text{mag}}(x_0|\ell, t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t \in I_k^{\text{FRB}}(x_0) \cup \tilde{I}_k^{\text{FRB}}(x_0) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.183)$$

Die Zeitintervalle, während derer ein an der Position x_0 erzeugtes Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k zur Verschränkungsentropie der beiden Subsysteme der Spinkette beiträgt, können Tabelle 3.1 entnommen

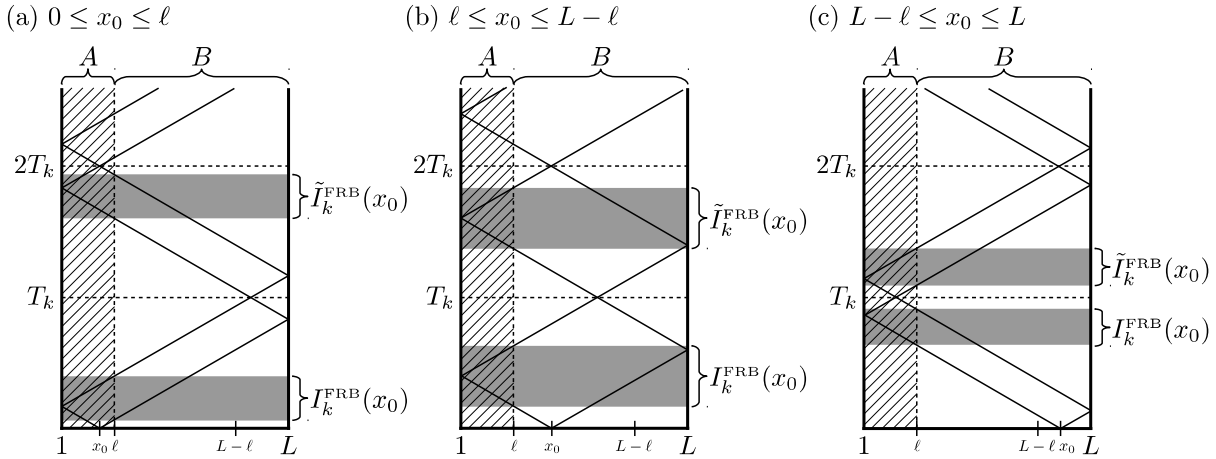


Abbildung 3.11: Zeitintervalle, in denen ein an der Position x_0 erzeugtes Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k für das System mit freien Randbedingungen einen Beitrag zur Verschränkungsentropie der Subsysteme A und B der Spinkette liefert. Der Beitrag besteht in den Zeitintervallen $I_k^{\text{FRB}}(x_0) = [t_{k,1}(x_0), t_{k,2}(x_0)] \subseteq [0, T_k]$ und $\tilde{I}_k^{\text{FRB}}(x_0) = [\tilde{t}_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0), \tilde{t}_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0)] \subseteq [T_k, 2T_k]$, während derer sich ein Quasiteilchen des Paares in Subsystem A und das andere in Subsystem B befindet. In Bezug auf die Erzeugung des Quasiteilchenpaares sind die Bereiche (a) $0 \leq x_0 \leq \ell$, (b) $\ell \leq x_0 \leq L - \ell$ und (c) $L - \ell \leq x_0 \leq L$ zu unterscheiden.

werden. Dabei folgt aus der Periodizität des Beitrages mit $2T_k$ und der Invarianz der Bewegung der Quasiteilchen unter Zeitumkehr

$$\tilde{t}_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0) = 2T_k - t_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0) \quad \text{und} \quad \tilde{t}_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0) = 2T_k - t_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0). \quad (3.184)$$

Da sich die Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares zur Wellenzahl k nach der Zeit T_k wieder treffen, sie sich zu diesem Zeitpunkt also auf jeden Fall im selben Subsystem befinden, und sie durch den Quench homogen entlang der gesamten Kette erzeugt wurden, ergibt sich eine Periodizität des Beitrages aller Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k zur Verschränkungsentropie mit Periodendauer T_k . Die Periodendauer der Quasiperiodizität der Verschränkungsentropie ist folglich gegeben durch $T_{\text{period}}^{\text{ent,FRB}} = L/v_{\text{max}}$. Die Überlegungen zur Periodendauer gestalten sich besonders einfach, wenn zwei gleich große Subsysteme betrachtet werden, d. h. sowohl A als auch B jeweils die Hälfte der Positionen der Kette umfassen. Für das System mit periodischen Randbedingungen ergeben sich Unterschiede zu dem System mit freien Randbedingungen in Bezug auf die Verschränkungsentropie zweier Subsysteme dadurch, dass zwischen den Subsystemen zwei Grenzflächen bestehen, durch die Quasiteilchen vom einen in das andere Subsystem gelangen können. Hierdurch ergibt sich eine Periodizität des Beitrages eines Quasiteilchenpaares zur Wellenzahl k von T_k . Die Periodendauer des Beitrages aller Quasiteilchenpaare zur Wellenzahl k zur Verschränkungsentropie halbiert sich somit auf $T_k/2$ und die Periodendauer der Quasiperiodizität der Verschränkungsentropie dementsprechend auf $T_{\text{period}}^{\text{ent,PRB}} = L/2v_{\text{max}}$. Weiterhin sind nun sechs Bereiche der Spinkette in Bezug auf die Position x_0 der Erzeugung eines Quasiteilchenpaares zu unterscheiden. In Tabelle 3.2 sind die Zeitintervalle, während derer ein an der Position x_0 erzeugtes Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k für das System mit periodischen Randbedingungen einen Beitrag zur Verschränkungsentropie der Subsysteme A und B leistet, in Abhängigkeit von der Größe ℓ des Subsystems A für die in Bezug auf x_0 zu unterscheidenden Bereiche der Kette zusammengefasst. Dabei ist

$$\tilde{t}_{k,1}^{\text{PRB}}(x_0) = T_k - t_{k,2}^{\text{PRB}}(x_0) \quad \text{und} \quad \tilde{t}_{k,2}^{\text{PRB}}(x_0) = T_k - t_{k,1}^{\text{PRB}}(x_0). \quad (3.185)$$

Im thermodynamischen Limes sagt die semiklassische Theorie für $\ell \gg 1$ für die Verschränkungsentropie im Falle freier Randbedingungen

$$S_\ell(t) = \begin{cases} t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| s_k & \text{für } t < \ell/v_{\text{max}} \\ \ell \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} s_k & \text{für } t \gg \ell/2v_{\text{max}} \end{cases} \quad (3.186)$$

	$I_k^{\text{FRB}}(x_0)$		$\tilde{I}_k^{\text{FRB}}(x_0)$	
	$t_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0)$	$t_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0)$	$\tilde{t}_{k,1}^{\text{FRB}}(x_0)$	$\tilde{t}_{k,2}^{\text{FRB}}(x_0)$
$0 \leq x_0 \leq \ell$	$(\ell - x_0)/ v_k $	$(\ell + x_0)/ v_k $	$(2L - \ell - x_0)/ v_k $	$(2L - \ell + x_0)/ v_k $
$\ell \leq x_0 \leq L - \ell$	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$(\ell + x_0)/ v_k $	$(2L - \ell - x_0)/ v_k $	$(2L - x_0 + \ell)/ v_k $
$L - \ell \leq x_0 \leq L$	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$(2L - \ell - x_0)/ v_k $	$(\ell + x_0)/ v_k $	$(2L - x_0 + \ell)/ v_k $

Tabelle 3.1: Zeitintervalle, in denen für das System mit freien Randbedingungen ein zum Zeitpunkt $t = 0$ an der Position x_0 der Spinkette erzeugtes Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k einen Beitrag zur Verschränkungsentropie der Subsysteme A und B leistet, d. h. sich ein Quasiteilchen des Paares in Subsystem A und das andere in Subsystem B befindet.

	$I_k^{\text{PRB}}(x_0)$		$\tilde{I}_k^{\text{PRB}}(x_0)$	
	$t_{k,1}^{\text{PRB}}(x_0)$	$t_{k,2}^{\text{PRB}}(x_0)$	$\tilde{t}_{k,1}^{\text{PRB}}(x_0)$	$\tilde{t}_{k,2}^{\text{PRB}}(x_0)$
$0 \leq x_0 \leq \frac{\ell}{2}$	$x_0/ v_k $	$(\ell - x_0)/ v_k $	$(L - \ell + x_0)/ v_k $	$(L - x_0)/ v_k $
$\frac{\ell}{2} \leq x_0 \leq \ell$	$(\ell - x_0)/ v_k $	$x_0/ v_k $	$(L - x_0)/ v_k $	$(L - \ell + x_0)/ v_k $
$\ell \leq x_0 \leq \frac{L}{2}$	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$x_0/ v_k $	$(L - x_0)/ v_k $	$(L - x_0 + \ell)/ v_k $
$\frac{L}{2} \leq x_0 \leq \frac{L}{2} + \frac{\ell}{2}$	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$(L - x_0)/ v_k $	$x_0/ v_k $	$(L - x_0 + \ell)/ v_k $
$\frac{L}{2} + \frac{\ell}{2} \leq x_0 \leq \frac{L}{2} + \ell$	$(L - x_0)/ v_k $	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$(L - x_0 + \ell)/ v_k $	$x_0/ v_k $
$\frac{L}{2} + \ell \leq x_0 \leq L$	$(L - x_0)/ v_k $	$(L + \ell - x_0)/ v_k $	$(x_0 - \ell)/ v_k $	$x_0/ v_k $

Tabelle 3.2: Zeitintervalle, in denen für das System mit periodischen Randbedingungen ein zum Zeitpunkt $t = 0$ an der Position x_0 der Spinkette erzeugtes Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k einen Beitrag zur Verschränkungsentropie der Subsysteme A und B leistet, d. h. sich ein Quasiteilchen des Paares in Subsystem A und das andere in Subsystem B befindet.

und im Falle periodischer Randbedingungen

$$S_\ell(t) = \begin{cases} 2t \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| s_k & \text{für } t < \ell/2v_{\text{max}} \\ \ell \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} s_k & \text{für } t \gg \ell/2v_{\text{max}} \end{cases} \quad (3.187)$$

voraus.

Bemerkungen

In den Herleitungen der semiklassischen Ausdrücke für die lokale Magnetisierung, die gleichzeitige Korrelationsfunktion und die Verschränkungsentropie wurden die Wellenzahlen k als kontinuierlich angenommen. Für die im Rahmen von Simulationen zugänglichen endlichen Systemgrößen sind die erlaubten Wellenzahlen diskret und ihre Anzahl entspricht der Anzahl der Spins des Systems. Die Integrale über k sind dementsprechend durch Summen über die erlaubten Werte von k zu ersetzen. Die im Falle freier Randbedingungen in der ferromagnetischen Phase auftretende komplexwertige Wellenzahl k_0 ist dabei für die semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses nicht von Bedeutung.

3.4.6 Thermodynamischer Limes und modifizierte Besetzungszahl

Calabrese, Essler und Fagotti konnten in [44, 47, 48] für das eindimensionale transversale Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen im thermodynamischen Limes exakte Ausdrücke für die Zeitentwicklung des Ordnungsparameters und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion herleiten. Die Herleitungen können in analoger Form für beliebige Freie-Fermionen-Modelle wie beispielsweise für das eindimensionale transversale XY-Modell ausgeführt werden. Ein Vergleich mit den Ausdrücken (3.165) und (3.179) der semiklassischen Theorie zeigt, dass beide Ergebnisse ineinander überführt werden können, wenn die Besetzungszahl f_k der Quasiteilchen nach dem Quench durch die effektive Besetzungszahl

$$\tilde{f}_k = -\frac{1}{2} \ln (|\cos(\Delta_k)|) \quad (3.188)$$

ersetzt wird. Δ_k ist die Differenz der Bogoliubov-Winkel gemäß (3.151). Aus (3.150) folgt

$$\cos(\Delta_k) = 1 - 2f_k \quad (3.189)$$

und damit

$$\tilde{f}_k = -\frac{1}{2} \ln (|1 - 2f_k|) . \quad (3.190)$$

\tilde{f}_k kann somit geschrieben werden als

$$\tilde{f}_k \approx f_k + \mathcal{O}(f_k^2) , \quad (3.191)$$

d. h. im Falle kleiner Besetzungszahlen gilt in erster Ordnung $\tilde{f}_k = f_k$. Die semiklassische Theorie stellt somit eine Approximation der exakten Zeitentwicklung im Grenzfall kleiner Besetzungszahlen, d. h. schwacher Quenches, dar. Die Verwendung der \tilde{f}_k als modifizierte Besetzungszahlen zur Berechnung des Ordnungsparameters und der Korrelationsfunktionen stellt eine phänomenologische Verbesserung der semiklassischen Theorie dar, die im Folgenden auch für Systeme endlicher Größe mit freien sowie periodischen Randbedingungen verwendet werden wird. Wie auch die Besetzungszahl f_k ist die modifizierte Besetzungszahl \tilde{f}_k sowohl von den Parametern des Hamiltonoperators \hat{H}_0 vor dem Quench als auch von den Parametern des Hamiltonoperators \hat{H} nach dem Quench abhängig und invariant gegenüber einer Umkehr der Richtung des Quenches, d. h. der Vertauschung von \hat{H}_0 und \hat{H} .

Für die Verschränkungsentropie zweier Subsysteme des eindimensionalen transversalen XY-Modells mit periodischen Randbedingungen wurden im thermodynamischen Limes von Fagotti und Calabrese in [67] exakte Ausdrücke hergeleitet. Ein Vergleich zeigt, dass diese gerade den Resultaten der semiklassischen Theorie in (3.187) entsprechen. Im Gegensatz zum Ordnungsparameter und den Korrelationsfunktionen ist diese Übereinstimmung unmittelbar gegeben ohne Einführung der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k . Betrachtung von Gleichung (3.188) zeigt, dass \tilde{f}_k divergiert, wenn $\cos(\Delta_k) = 0$ bzw. $f_k = 1/2$. Im Folgenden soll das Auftreten von Nullstellen von $\cos(\Delta_k)$ in Abhängigkeit vom Quenchprotokoll diskutiert werden. Ausgehend von $\cos(\Delta_k) = 0$ ergibt sich mit (3.151) die folgende Bestimmungsgleichung für Nullstellen des Zählers von $\cos(\Delta_k)$:

$$hh_0 + JJ_0\gamma\gamma_0 - (Jh_0 + J_0h) \cos(k) + JJ_0(1 - \gamma\gamma_0) \cos^2(k) = 0 . \quad (3.192)$$

Hierbei sei $0 < J, J_0 \leq 1$, $0 \leq \gamma, \gamma_0 \leq 1$ und $0 \leq h, h_0$. Ist der aus (3.192) bestimmte Wert von k zugleich Nullstelle von Λ_k oder $\Lambda_k^{(0)}$, d. h. Nullstelle des Nenners von $\cos(\Delta_k)$, so ist der Wert von $\cos(\Delta_k)$ mithilfe der Regel von de l'Hospital zu bestimmen. Bei der Auflösung der Bestimmungsgleichung (3.192) nach k sind drei Fälle zu unterscheiden:

- $\gamma \neq 1 \vee \gamma_0 \neq 1$

In diesem Fall verschwindet der letzte Summand von (3.192) nicht und es ergibt sich

$$k = \arccos \left(\frac{Jh_0 + J_0h \pm \sqrt{(Jh_0 - J_0h)^2 + 4JJ_0\gamma\gamma_0(hh_0 - JJ_0(1 - \gamma\gamma_0))}}{2JJ_0(1 - \gamma\gamma_0)} \right) . \quad (3.193)$$

Damit Nullstellen von $\cos(\Delta_k)$ existieren können, muss das Argument von \arccos im Intervall $[-1, 1]$ liegen. Es können somit für $\gamma \neq 1 \vee \gamma_0 \neq 1$ zwei, eine oder keine Nullstellen von $\cos(\Delta_k)$ existieren.

- $(\gamma = \gamma_0 = 1) \wedge (h \neq 0 \vee h_0 \neq 0)$

Der letzte Summand von (3.192) verschwindet und es ist

$$k = \arccos \left(\frac{hh_0 + JJ_0}{Jh_0 + J_0h} \right). \quad (3.194)$$

Es kann somit höchstens eine Nullstelle von $\cos(\Delta_k)$ existieren.

- $(\gamma = \gamma_0 = 1) \wedge (h \neq 0 = h_0 = 0)$

Es existiert keine Nullstelle von $\cos(\Delta_k)$.

3.5 Resultate

Nach der Beschreibung der Freie-Fermionen-Technik und der semiklassischen Theorie sowie ihrer Anwendung auf das eindimensionale transversale XY-Modell sollen diese nun genutzt werden, um nach unterschiedlichen Quenchprotokollen die Zeitentwicklung verschiedener Observablen des Systems zu berechnen. Die Ergebnisse der semiklassischen Theorie werden hierbei mit den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik verglichen, um Aussagen in Bezug auf ihre Genauigkeit und den Parameterbereich zu treffen, in dem sie angewendet werden kann. Untersucht werden Ketten der Länge $L = 256$ mit freien Randbedingungen sowie mit periodischen Randbedingungen. Die Quenchprotokolle sind in der Tabelle in Abbildung 3.12 angegeben und in der nebenstehenden Grafik veranschaulicht.

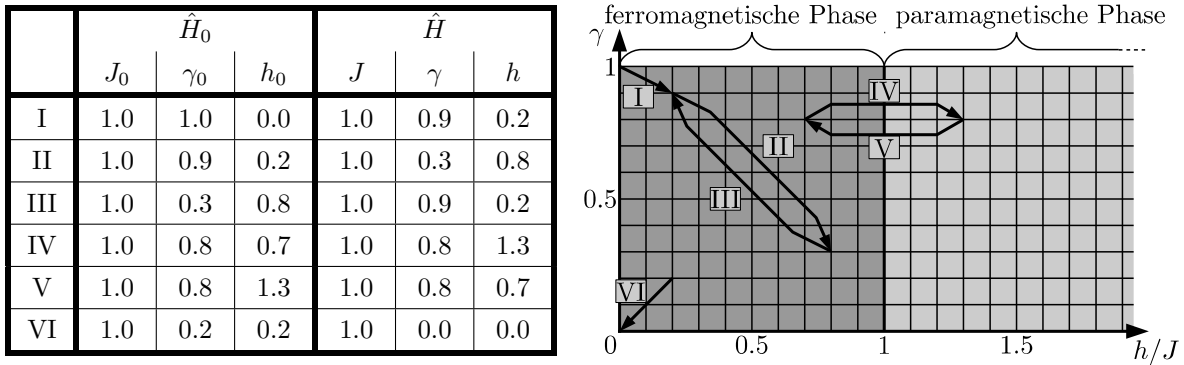


Abbildung 3.12: Betrachtete Quenchprotokolle sowie Illustration derselben im Phasendiagramm. Quench I stellt einen Quench vom Ising-Modell ohne Transversalfeld zum transversalen XY-Modell dar. Die Quenchprotokolle II und III sowie IV und V beschreiben zueinander inverse Quenchs des transversalen XY-Modells. Während Anfangs- und Endpunkte der Quenchs II und III in der ferromagnetischen Phase liegen, überführen die Quenchs IV und V das System von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase und umgekehrt. Quench VI stellt einen Quench vom transversalen XY-Modell zum XX-Modell ohne Transversalfeld dar.

Es werden die sechs Quenchprotokolle aus [68] betrachtet, die mit I bis VI bezeichnet werden. Die Kopplungskonstante wird durch keines der Quenchprotokolle verändert, d. h. $J_0 = J = 1$. Quenchprotokoll I schaltet ausgehend vom Ising-Modell (keine Kopplung der Spins in y -Richtung $\gamma_0 = 1$, kein Transversalfeld $h_0 = 0$) eine schwache Kopplung der Spins in y -Richtung ($\gamma = 0.9$) sowie ein schwaches Transversalfeld ($h = 0.2$) ein, stellt also einen Quench vom Ising-Modell ohne Transversalfeld zum transversalen XY-Modell dar. Bei den Quenchs II und III handelt es sich um zueinander inverse Quenchs des transversalen XY-Modells innerhalb der ferromagnetischen Phase zwischen den Punkten $\gamma = 0.9, h = 0.2$ und $\gamma = 0.3, h = 0.8$. Durch sie werden sowohl die Anisotropie als auch das Transversalfeld verändert. Die Quenchs IV und V stellen zueinander inverse Quenchs des transversalen XY-Modells über den kritischen Punkt von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase bzw. von der paramagnetischen in die ferromagnetische Phase zwischen den Punkten $\gamma = 0.8, h = 0.7$ und $\gamma = 0.8, h = 1.3$ dar. Sie halten die Anisotropie konstant und ändern lediglich das Transversalfeld. Quench VI schließlich überführt das transversale XY-Modell mit $\gamma_0 = 0.2$ und $h_0 = 0.2$ in das XX-Modell ohne Transversalfeld ($\gamma = 0, h = 0$), ändert also die Universalitätsklasse des Systems. Nach Quench VI erfolgt die Propagation der Quasiteilchen im System nur durch die Wirkung der $\hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y$ -Terme.

Vor der Betrachtung der Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie, der lokalen Magnetisierung und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion werde die Energie der Quasiteilchen nach dem Quench, ihre Geschwindigkeit sowie ihre Besetzungszahlen untersucht. Die genannten Größen sind in Abbildung 3.13 dargestellt. Abbildung 3.13 (a) zeigt die Energie Λ_k der Quasiteilchen nach dem Quench, Abbildung 3.13 (b) den Betrag $|v_k|$ ihrer Geschwindigkeiten. Da die Quenchs I und III am selben Punkt im Phasendiagramm enden, haben die Quasiteilchen nach ihnen die gleichen Energien und folglich die gleichen Geschwindigkeiten. Da für die Quenchs II und VI $h/J < 1 - \gamma^2$ ist, liegt das absolute Minimum der Λ_k im Innern des Intervalls $[0, \pi]$. Im Falle von Quench VI sind wegen $h = 0$ die Λ_k symmetrisch bzgl. $k = \pi/2$

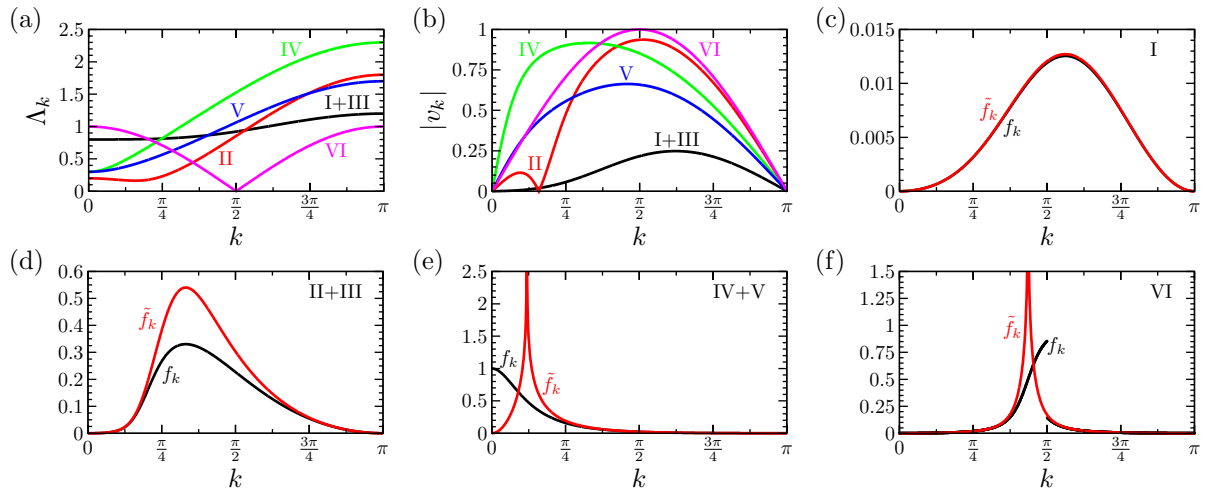


Abbildung 3.13: (a) Spektrum des Hamiltonoperators nach den Quenchs I- VI. (b) Geschwindigkeiten der Quasiteilchen der semiklassischen Theorie nach den Quenchs I- VI. (c) - (f) Vergleich der Besetzungszahl f_k und der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k nach den Quenchs I- VI. Während die Energien der Quasiteilchen und ihre Geschwindigkeiten nur von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench abhängig sind, sind ihre Besetzungszahlen eine Funktion des Quenchprotokolls, d. h. des Hamiltonoperators vor und des Hamiltonoperators nach dem Quench.

und das Minimum wird für diese Wellenzahl angenommen. Für die anderen Quenchs wächst die Energie Λ_k streng monoton mit k . Das Auftreten des Minimums der Λ_k im Innern von $[0, \pi]$ im Falle der Quenchs II und VI äußert sich auch in den Geschwindigkeiten. Für Quenchprotokoll II existieren aufgrund des Minimums im Innern von $[0, \pi]$ und der Differenzierbarkeit von Λ_k nach k an der entsprechenden Stelle Quasiteilchen, deren Geschwindigkeit verschwindet. Im Falle von Quenchprotokoll VI sind die Geschwindigkeiten negativ für $k < \pi/2$ und positiv für $k > \pi/2$. Da Λ_k an der Stelle $k = \pi/2$ nicht differenzierbar ist (die linksseitige Ableitung ist -1 , die rechtsseitige Ableitung $+1$), ist die Geschwindigkeit der Quasiteilchen zur Wellenzahl $k = \pi/2$ nicht definiert. Da die Quasiteilchen jedoch paarweise erzeugt werden und sich die Quasiteilchen eines Paares aufgrund der Impulserhaltung zum Zeitpunkt ihrer Erzeugung mit entgegengesetzter Geschwindigkeit bewegen, ist nur der Betrag der Geschwindigkeit von Bedeutung. Da die Beträge der links- und der rechtsseitigen Ableitung an der Stelle $k = \pi/2$ übereinstimmen, ist somit $|v_{\pi/2}| = 1$.

Bei den Betrachtungen der Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie und der lokalen Magnetisierung wird gemäß den Überlegungen der vorigen Abschnitte eine Quasiperiodizität erwartet, deren Periodendauer von den schnellsten durch den Quench erzeugten Quasiteilchen bestimmt wird. In beiden Fällen ist $T_{\text{period}} = L/v_{\text{max}}$. Tabelle 3.3 enthält für die betrachteten Quenchprotokolle den Wert von v_{max} sowie die sich daraus ergebenden Periodendauern.

	I	II	III	IV	V	VI
v_{max}	0.248162	0.937045	0.248162	0.916614	0.663059	1
T_{period}	1031.58	273.199	1031.58	279.289	386.089	256

Tabelle 3.3: Betrag der Maximalgeschwindigkeit der Quasiteilchen nach den Quenchprotokollen I- VI sowie sich daraus ergebende Periodendauer $T_{\text{period}} = L/v_{\text{max}}$ der Quasiperiodizität der Verschränkungsentropie sowie der lokalen Magnetisierung im Falle freier Randbedingungen.

In den Graphen (c)-(f) von Abbildung 3.13 sind die Besetzungszahlen f_k der Quasiteilchen nach den Quenchprotokollen I- VI dargestellt und mit den modifizierten Besetzungszahlen \tilde{f}_k verglichen. Da die Quenchprotokolle II und III sowie IV und V zueinander inverse Quenchs beschreiben, ergeben sich für

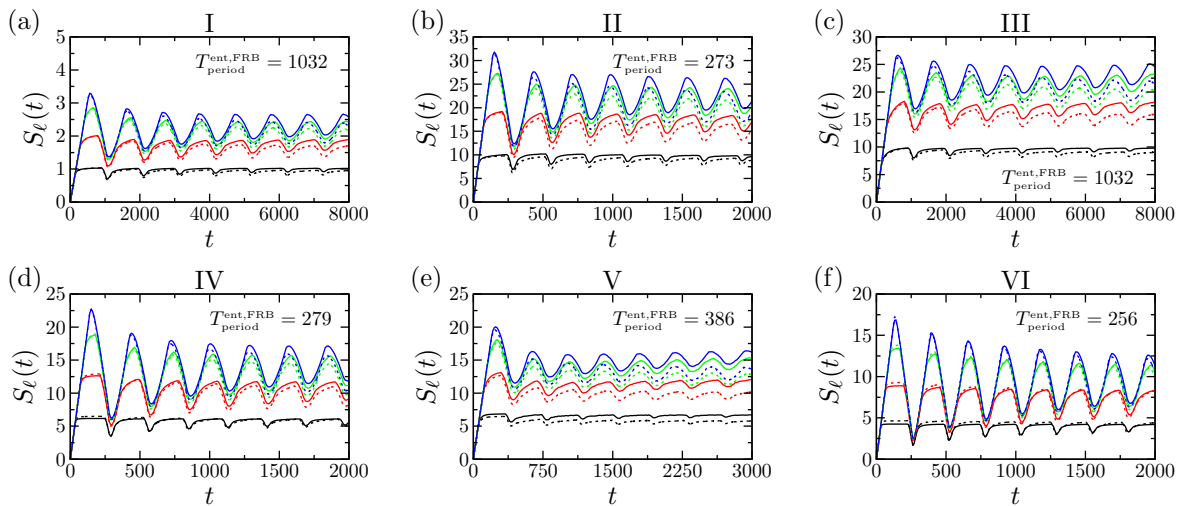


Abbildung 3.14: (a)-(f) Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie $S_\ell(t)$ zweier Subsysteme einer Kette der Länge $L = 256$ mit freien Randbedingungen nach den Quenches I-VI für verschiedene Größen der Subsysteme ($-\ell = 32$, $-\ell = 64$, $-\ell = 96$, $-\ell = 128$). ℓ bezeichnet hierbei die Größe des Subsystems A , welches sich am linken Rand der Kette befindet. Subsystem B umfasst die restlichen Positionen der Kette. Kontinuierliche Linien stellen die Resultate der Berechnungen mittels Freier-Fermionentechniken dar, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit der Besetzungszahl f_k . Bei den angegebenen Periodendauern der Quasiperiodizität handelt es sich um die Vorhersagen der semiklassischen Theorie.

diese die gleichen Werte der f_k und der \tilde{f}_k . Durch den schwachen Quench in Quenchprotokoll I wird nur eine geringe Anzahl an Quasiteilchen erzeugt. Ihre Besetzungszahl f_k ist infolgedessen gering und weist nur sehr geringe Abweichungen von der aus den exakten Resultaten im thermodynamischen Limes extrahierten modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k auf. Die semiklassische Theorie stellt somit für diesen schwachen Quench auch ohne Verwendung der modifizierten Besetzungszahl eine gute Approximation dar. Durch die stärkeren Quenchs innerhalb der ferromagnetischen Phase in den Quenchprotokollen II und III wird eine größere Anzahl Quasiteilchen im System erzeugt. Aus diesem Grund ergeben sich hier auch größere Abweichungen zwischen den f_k und den \tilde{f}_k . Diese Abweichungen sind jedoch nur quantitativer Natur, wohingegen der qualitative Verlauf von f_k und \tilde{f}_k für die Quenchprotokolle II und III übereinstimmt. Im Gegensatz hierzu ergeben sich im Falle der Quenchs IV und V, die das System von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase bzw. umgekehrt überführen, auch deutliche Unterschiede im qualitativen Verlauf der Besetzungszahl und der modifizierten Besetzungszahl. Während f_k für $k = 0$ seinen Maximalwert 1 erreicht und für $k > 0$ streng monoton auf 0 abfällt, wenn k gegen π strebt, hat \tilde{f}_k sowohl für $k = 0$ als auch für $k = \pi$ den Wert 0 und divergiert sowohl bei linksseitiger als auch bei rechtsseitiger Annäherung an $k \approx 0.373583$. Eine Übereinstimmung zwischen f_k und \tilde{f}_k besteht dabei nur für große k . Für den letzten betrachteten Quench VI hin zum XX-Modell ohne Transversalfeld zeigt sich eine Unstetigkeit in den Besetzungszahlen f_k an der Stelle $k = \pi/2$. Der linksseitige Grenzwert ist mit einem Wert von ungefähr 0.853553 etwa sechsmal so groß wie der rechtsseitige Grenzwert mit einem Wert von ungefähr 0.143765. Für die modifizierte Besetzungszahl \tilde{f}_k hingegen hat die Wellenzahl $k = \pi/2$, in Bezug auf die Λ_k und v_k eine Symmetrie und f_k die beschriebene Unstetigkeit aufweisen, keine besondere Bedeutung, jedoch divergiert \tilde{f}_k für $k \approx 1.36944$. Die exakten Werte von k , für die \tilde{f}_k divergiert, sind durch die Nullstellen von (3.151) auf dem Intervall $[0, \pi]$ gegeben.

Verschränkungsentropie

Nach den grundlegenden Überlegungen zu den durch die Quenchs erzeugten Quasiteilchen soll nun die Zeitentwicklung der Observablen untersucht werden. Den Anfang bildet die Verschränkungsentropie zweier Subsysteme A und B , welche sowohl für das System mit freien als auch für das System mit periodischen Randbedingungen betrachtet wird. In Abbildung 3.14 ist die Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie der Subsysteme nach den Quenchprotokollen I-VI für das System mit freien Randbedingungen darge-

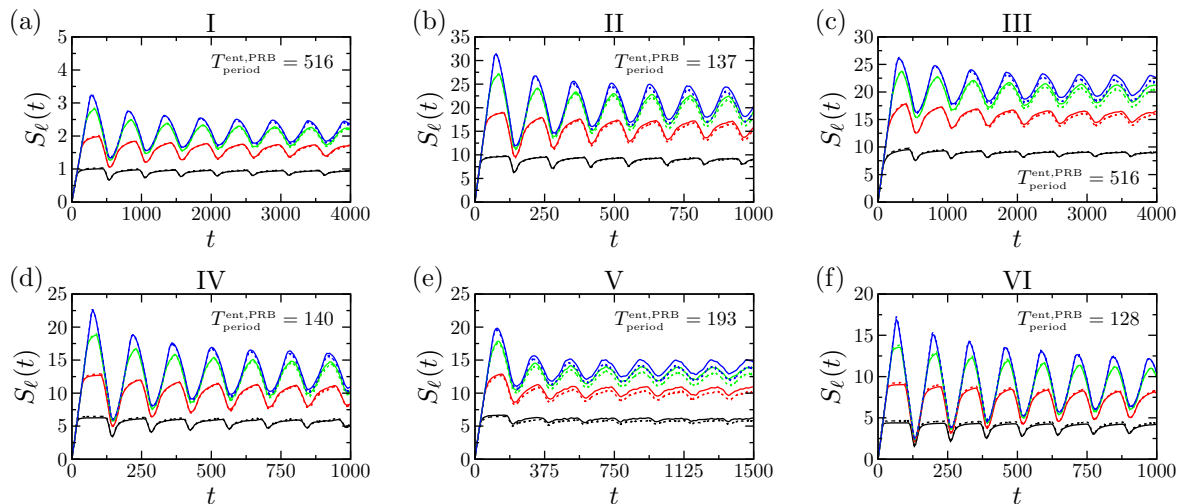


Abbildung 3.15: (a)-(f) Zeitentwicklung der Verschränkungsentropie $S_\ell(t)$ zweier Subsysteme einer Kette der Länge $L = 256$ mit periodischen Randbedingungen nach den Quenches I-VI für verschiedene Größen der Subsysteme ($-\ell = 32$, $-\ell = 64$, $-\ell = 96$, $-\ell = 128$). ℓ bezeichnet hierbei die Größe des Subsystems A . Subsystem B umfasst die restlichen Positionen der Kette. Kontinuierliche Linien stellen die Resultate der Berechnungen mittels Freier-Fermionen-Techniken dar, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit der Besetzungszahl f_k . Bei den angegebenen Periodendauern der Quasiperiodizität handelt es sich um die Vorhersagen der semiklassischen Theorie.

stellt und in Abbildung 3.15 für das System mit periodischen Randbedingungen. Die Kette ist in die Subsysteme A und B aufgeteilt. Im Falle des Systems mit freien Randbedingungen befindet sich Subsystem A am linken Rand der Kette. Die Größe von Subsystem A und damit auch die Größe von Subsystem B wird variiert. Ein Vergleich der Resultate der semiklassischen Theorie zu den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik zeigt für alle Quenchprotokolle sowohl für das System mit freien als auch für das System mit periodischen Randbedingungen eine hervorragende Übereinstimmung des anfänglichen Anstiegs der Verschränkungsentropie der Subsysteme nach dem Quench. Für größere Zeiten ergeben sich insbesondere im Falle freier Randbedingungen Abweichungen zwischen den exakten Resultaten und den Resultaten der semiklassischen Theorie. Aufgrund ihres Auftretens vor allem für das System mit freien Randbedingungen und ihrer Zunahme mit der Anzahl der durchlaufenen Perioden, kann davon ausgegangen werden, dass sie zu einem großen Teil durch die vereinfachte Beschreibung der Reflexion der Quasiteilchen an den Kettenenden hervorgerufen werden. Die Abweichungen sind aus diesem Grund während der ersten Periode noch nicht vorhanden und summieren sich im Folgenden über die Perioden auf. Infolgedessen nehmen die Abweichungen mit der Zeit zu. Die Periodizität der Verschränkungsentropie hingegen wird durch die semiklassische Theorie sehr gut wiedergegeben. Die Periodendauer der Verschränkungsentropie ist wie in der semiklassischen Theorie vorhergesagt im Falle freier Randbedingungen doppelt so lang wie im Falle periodischer Randbedingungen und entspricht dem sich aus der Maximalgeschwindigkeit der Quasiteilchen ergebenden Wert. Die Quasiperiodizität wird somit in der Tat durch die Quasiteilchen mit der höchsten Geschwindigkeit bestimmt. In den Graphen ist deutlich zu erkennen, dass die Verschränkungsentropie nach einer Periode ihrer Quasiperiodizität nicht wieder auf null abfällt und für größere Zeiten auch nicht mehr der Wert zur Hälfte ihrer ersten Periode erreicht wird. Ursächlich hierfür ist die beschriebene unterschiedliche Geschwindigkeit der Quasiteilchen zu verschiedenen Wellenzahlen, die dazu führt, dass die Quasiteilchen zu verschiedenen Wellenzahlen in ihrer Bewegung durch das System relativ zu Quasiteilchen zu einer anderen Wellenzahl aus der Phase geraten. Erst nach einer Zeit, die dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen der Periodendauern der Quasiteilchen zu jeder Wellenzahl k entspricht, hat das System seine Anfangskonfiguration wieder erreicht. Die beobachtete Periodizität der Verschränkungsentropie und anderer Observablen wird daher wie bereits erläutert als Quasiperiodizität bezeichnet.

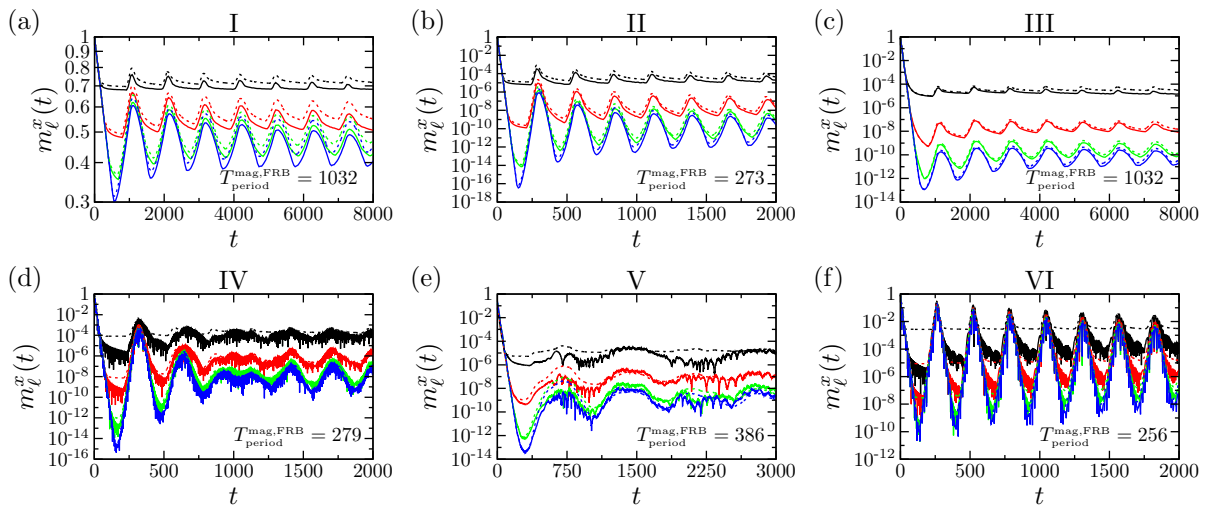


Abbildung 3.16: (a)-(f) Zeitentwicklung der lokalen Magnetisierung $m_\ell^x(t)$ nach den Quenches I-VI für verschiedene Positionen der Kette ($-\ell = 32$, $-\ell = 64$, $-\ell = 96$, $-\ell = 128$). Betrachtet wird eine Kette der Länge $L = 256$ mit freien Randbedingungen. Kontinuierliche Linien stellen die Resultate der Berechnungen mittels Freier-Fermionen-Techniken dar, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k . Bei den angegebenen Periodendauern der Quasiperiodizität handelt es sich um die Vorhersagen der semiklassischen Theorie.

Lokale Magnetisierung

Nach der Verschränkungsentropie soll nun die lokale Magnetisierung untersucht werden. Diese wird für das System mit freien Randbedingungen betrachtet. Die Resultate für die Zeitentwicklung der lokalen Magnetisierung sind für die Quenchprotokolle I-VI in Abbildung 3.16 dargestellt. Die exakten Resultate der Freie-Fermionen-Technik werden mit den Resultaten der semiklassischen Theorie unter Verwendung der modifizierten Besetzungszahl verglichen. Aufgrund des exponentiellen Abfalls der lokalen Magnetisierung im Regime freier Relaxation ist die lokale Magnetisierung logarithmisch gegen die Zeit aufgetragen. Für alle untersuchten Quenches zeigt sich, dass der initiale Abfall der lokalen Magnetisierung, d. h. das Regime freier Relaxation der ersten Periode der Quasiperiodizität, hervorragend reproduziert wird. Weiterhin gibt die semiklassische Theorie die Quasiperiodizität der lokalen Magnetisierung sehr gut wieder. Wie in der qualitativen Beschreibung des zeitlichen Verlaufs der lokalen Magnetisierung erläutert, gibt es im Laufe jeder Periode ein Regime freier Relaxation mit exponentiellem Abfall der lokalen Magnetisierung, ein quasistationäres Regime, in dem die lokale Magnetisierung bedeutend langsamer abfällt bzw. konstant bleibt, sowie ein Wiederherstellungsregime, in dem die lokale Magnetisierung wieder exponentiell anwächst. Die Quasiperiodizität wird wiederum hervorgerufen durch die unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Quasiteilchen zu verschiedenen Wellenzahlen k . Hierdurch ergibt sich im quasistationären Regime ein weiterer, wenn auch schwächerer Abfall der lokalen Magnetisierung, und die lokale Magnetisierung erreicht im Wiederherstellungsregime nicht wieder ihren ursprünglichen Wert. Die Periodendauer der Quasiperiodizität wird durch die schnellsten durch den Quench erzeugten Quasiteilchen bestimmt. Für die Quenches I bis III, die vollständig innerhalb der ferromagnetischen Phase verlaufen, zeigen auch die mit der semiklassischen Theorie mit der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k bestimmten Werte der lokalen Magnetisierung eine gute Übereinstimmung, die mit der Anzahl der Perioden abnimmt. Die Erklärung hierfür ist wie im Falle der Verschränkungsentropie die vereinfachte Darstellung der Reflexion der Quasiteilchen an den Enden der Kette. Für die Quenches IV und V, die das System von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase überführen und umgekehrt, sowie Quench VI hin zum XX-Modell ohne Transversalfeld zeigen sich insbesondere für Positionen abseits der Mitte der Kette Abweichungen zwischen den exakten Resultaten und den Resultaten der semiklassischen Theorie im quasistationären Regime. Für Quenchprotokoll V von der paramagnetischen in die ferromagnetische Phase zeigen sich auch Abweichungen in Bezug auf die Periodendauer der Quasiperiodizität. Die Resultate der Freie-Fermionen-Technik und die der semiklassischen Theorie stimmen zwar überein, weichen jedoch von der vorhergesagten Periodendauer ab.

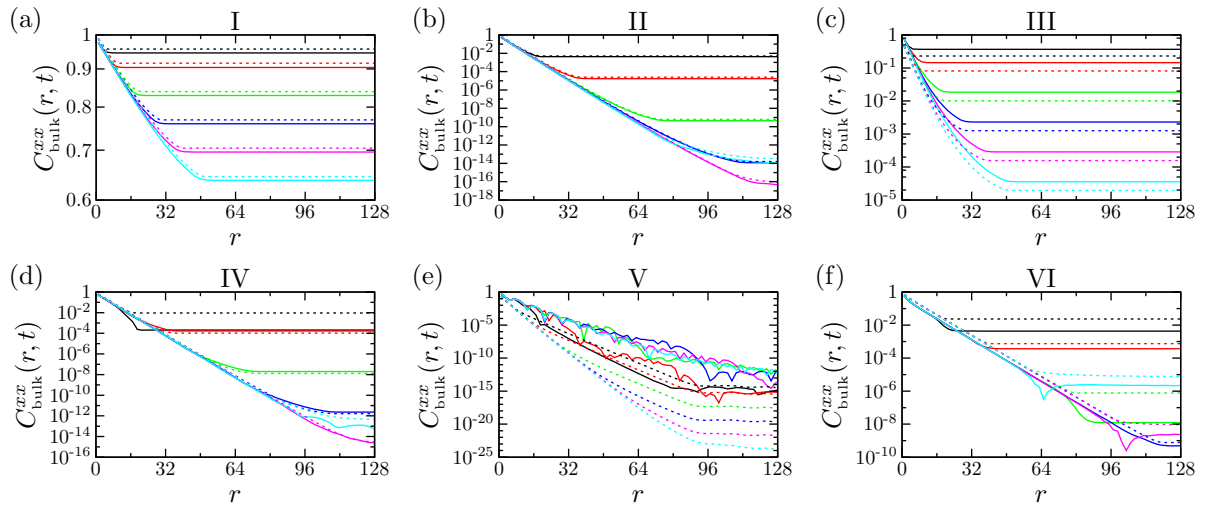


Abbildung 3.17: (a)-(f) Bulk-Korrelationsfunktion $C_{\text{bulk}}^{xx}(r, t)$ für das System mit freien Randbedingungen als Funktion des Abstandes r der beiden betrachteten Positionen der Kette zu verschiedenen Zeitpunkten ($- t = 10$, $- t = 20$, $- t = 40$, $- t = 60$, $- t = 80$, $- t = 100$) nach den Quenches I-VI. Betrachtet wird eine Kette der Länge $L = 256$. Kontinuierliche Linien stellen die Resultate der Berechnungen mittels Freier-Fermionen-Techniken dar, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k .

Gleichzeitige Korrelationsfunktion

Die letzte betrachtete Observable ist die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins. Während für das System mit periodischen Randbedingungen nur der Abstand der beiden Spins von Bedeutung ist, spielt für das System mit freien Randbedingungen auch ihre Position relativ zu den Kettenenden eine Rolle. Zur Minimierung von Randeffekten wird für das System mit freien Randbedingungen die Bulk-Korrelationsfunktion betrachtet, d. h. die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins, die symmetrisch bzgl. der Mitte der Kette angeordnet sind. Die exakten Resultate der Freie-Fermionen-Technik werden jeweils mit den Resultaten der semiklassischen Theorie verglichen. Wie bei der Beschreibung der Bestimmung der Bulk-Korrelationsfunktion mithilfe der semiklassischen Theorie erläutert wurde, unterscheiden sich die Resultate der semiklassischen Theorie für die Bulk-Korrelationsfunktion der Kette mit freien Randbedingungen von den Resultaten der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins der Kette mit periodischen Randbedingungen nur durch einen durch die Gleichgewichtskorrelationsfunktion gegebenen Vorfaktor. Für hinreichend große Kettenlängen und hinreichend großen Abstand der beiden betrachteten Spins von den Kettenenden verschwinden die Unterschiede. Die gleichzeitige Korrelationsfunktion wird zu einem festen Zeitpunkt betrachtet und in Abhängigkeit vom Abstand r der beiden Positionen aufgetragen. In Abbildung 3.17 sind die Ergebnisse der exakten Rechnung mithilfe der Freie-Fermionen-Technik für die Bulk-Korrelationsfunktion der Kette mit freien Randbedingungen aufgetragen und den Resultaten der semiklassischen Theorie mit der modifizierten Besetzungszahl nach den Quenches I-VI zu verschiedenen Zeitpunkten gegenübergestellt. Die betrachteten Zeitpunkte liegen alle innerhalb der ersten Periode der Quasiperiodizität des Systems. Im Gleichgewicht hat die Korrelationsfunktion zweier Spins innerhalb der ferromagnetischen Phase bereits für relativ kleine Abstände einen konstanten, nicht verschwindenden Wert. Nach dem Quench fällt die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins exponentiell ab (Regime freier Relaxation), bis sie zueinander relaxiert sind. Im Anschluss daran bleibt sie zeitlich konstant (quasistationäres Regime), bis sie aufgrund der Quasiperiodizität wiederhergestellt wird (Wiederherstellungsregime). Eine Erklärung für dieses Verhalten wurde im Rahmen der qualitativen Beschreibung der Zeitentwicklung der Observablen mithilfe der semiklassischen Theorie gegeben. In der Auftragung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zu einem festen Zeitpunkt in Abhängigkeit vom Abstand der betrachteten Spins zeigen Spinpaare, die zu dem Zeitpunkt zueinander relaxiert sind, einen exponentiellen Abfall ihrer Korrelationsfunktion mit dem Abstand. Aus diesem Abfall kann die Korrelationslänge bestimmt werden. Für Spinpaare hingegen, die zu dem betrachteten Zeitpunkt nicht zueinander relaxiert sind, ändert sich die gleichzeitige Korrelationsfunktion mit dem Abstand nicht. Während die

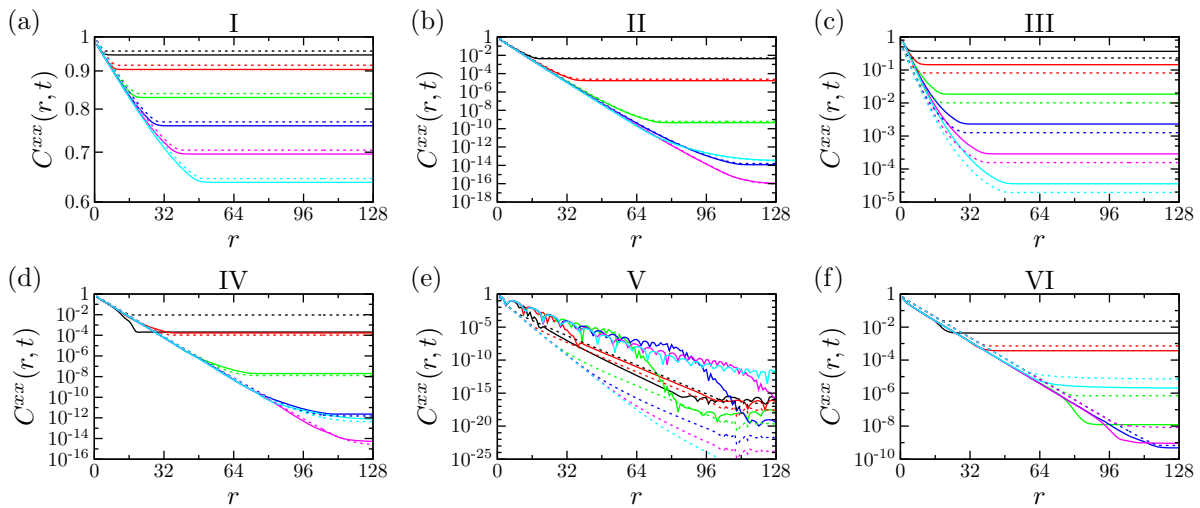


Abbildung 3.18: (a)-(f) Gleichzeitige Korrelationsfunktion $C^{xx}(r, t)$ für das System mit periodischen Randbedingungen als Funktion des Abstandes r der beiden betrachteten Positionen der Kette zu verschiedenen Zeitpunkten ($- t = 10$, $- t = 20$, $- t = 40$, $- t = 60$, $- t = 80$, $- t = 100$) nach den Quenchs I-VI. Betrachtet wird eine Kette der Länge $L = 256$. Kontinuierliche Linien stellen die Resultate der Berechnungen mittels Freier-Fermionen-Techniken dar, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k .

gleichzeitige Korrelationsfunktion zueinander relaxierter Spinpaare zeitlich konstant bleibt bis zur Wiederherstellung der Korrelation aufgrund der durch die endliche Systemgröße bedingten Quasiperiodizität, fällt die Korrelationsfunktion noch nicht zueinander relaxierter Spins mit der Zeit weiter exponentiell ab, bis die Spins zueinander relaxiert sind. Das beschriebene Verhalten ist in den Graphen von Abbildung 3.17 deutlich zu erkennen. Mit zunehmender Zeit erstreckt sich der exponentielle Abfall der gleichzeitigen Korrelationsfunktion über einen immer größeren Bereich der Kette, d. h. Spinpaare mit immer größerem Abstand sind zueinander relaxiert. Der Bereich der Kette mit nicht zueinander relaxierten Spins wird dabei immer kleiner. Zugleich fällt der Wert der Korrelationsfunktion der nicht zueinander relaxierten Spins mit der Zeit immer weiter ab. Für die Quenchprotokolle II und IV hat zum Zeitpunkt $t = 100$ die Wiederherstellung der Korrelationen bereits begonnen und für das Quenchprotokoll VI bereits bei $t = 80$. Ein Vergleich zu den Resultaten der semiklassischen Theorie zeigt abgesehen von Quenchprotokoll IV, welches das System von der paramagnetischen in die ferromagnetische Phase überführt, eine gute Übereinstimmung.

Die bisherigen Betrachtungen galten der Bulk-Korrelationsfunktion des Systems mit freien Randbedingungen. Nach den Vorhersagen der semiklassischen Theorie sollte sich eine gute Übereinstimmung zur der in Abbildung 3.18 dargestellten gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins der Kette mit periodischen Randbedingungen ergeben. Ein Vergleich der Graphen zeigt, dass dies in der Tat der Fall ist. Abgesehen von Quenchprotokoll V aus der paramagnetischen in die ferromagnetische Phase stimmen die Resultate für die Bulk-Korrelationsfunktion des Systems mit freien Randbedingungen und die gleichzeitige Korrelationsfunktion des Systems mit periodischen Randbedingungen nahezu überein. Der Vergleich der Resultate der semiklassischen Theorie zu den exakten Resultaten der Freier-Fermionen-Technik für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins des Systems mit periodischen Randbedingungen zeigt eine noch bessere Übereinstimmung als für die Bulk-Korrelationsfunktion zweier Spins des Systems mit freien Randbedingungen. Die beobachteten Abweichungen für die verschiedenen Quenchprotokolle sind qualitativ die gleichen wie für das System mit freien Randbedingungen, jedoch quantitativ betrachtet geringer. Ursache hierfür ist wieder die bereits bei der Betrachtung der Verschränkungsentropie zweier Subsysteme der Kette erwähnte vereinfachte Beschreibung der Reflexion der Quasiteilchen an den Kettenenden für das System mit freien Randbedingungen.

3.6 Vergleich zu Systemen im thermischen Gleichgewicht und verallgemeinertes Gibbs-Ensemble

Rossini *et al.* haben in [39, 41] die Zeitentwicklung verschiedener Observablen des transversalen Ising-Modells mit periodischen Randbedingungen untersucht und mit Resultaten für das System im thermischen Gleichgewicht verglichen. Ihr zentrales Ergebnis in Bezug auf Thermalisierung des Systems nach dem Quench bestand darin, dass Observablen, deren Operatoren nichtlokal sind ausgedrückt über die den Hamiltonoperator diagonalisierenden Fermioperatoren, thermisches Verhalten zeigen. Als Beispiele für derartige Observablen wurden die Autokorrelationsfunktion und die gleichzeitige Korrelationsfunktion untersucht. Demgegenüber wurde für Observablen, deren Operatoren lokal sind ausgedrückt über die Fermioperatoren, in denen der Hamiltonoperator diagonal ist, Abweichungen von Thermalisierung nachgewiesen. Beispiele hierfür sind die gleichzeitige Korrelationsfunktion in z -Richtung und die Kinkdichte im System. Für diese wurde gezeigt, dass sie mithilfe des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles beschrieben werden können. Aufgrund der Integrabilität des transversalen Ising-Modells ist jedoch zu erwarten, dass es nicht thermalisieren kann, d. h. seine Observablen nicht durch das kanonische Gibbs-Ensemble mit einer effektiven Temperatur T_{eff} beschrieben werden können, sondern für alle Observablen die Verwendung des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles erforderlich ist. Im Folgenden soll erläutert werden, wie die Resultate von Rossini *et al.* für die Autokorrelationsfunktion und die gleichzeitige Korrelationsfunktion damit in Einklang gebracht werden können.

Rossini *et al.* haben in [41] die effektive Temperatur des Systems nach dem Quench dadurch bestimmt, dass der Erwartungswert des Hamiltonoperators in einem thermischen Zustand mit seinem (zeitunabhängigen) Erwartungswert nach dem Quench übereinstimmen muss:

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \hat{H} | \Psi_0^{(0)} \rangle \stackrel{!}{=} \langle \hat{H} \rangle_{T_{\text{eff}}} . \quad (3.195)$$

Der Erwartungswert der Energie im System im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T_{eff} kann geschrieben werden als

$$\langle \hat{H} \rangle_{T_{\text{eff}}} = \sum_k \Lambda_k (n_{k, T_{\text{eff}}} - 1) \quad (3.196)$$

mit

$$n_{k, T} = \frac{1}{e^{\Lambda_k/T} + 1} \quad (3.197)$$

der Fermi-Verteilungsfunktion der Quasiteilchen bei der Temperatur T . Der Erwartungswert der Energie im System nach dem Quench ist

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \hat{H} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_k \Lambda_k (f_k - 1) \quad (3.198)$$

mit f_k der bekannten Besetzungszahl der Quasiteilchen gemäß (3.148). Aus der Bestimmungsgleichung (3.195) für die effektive Temperatur ergibt sich somit

$$\sum_k \Lambda_k f_k = \sum_k \Lambda_k n_{k, T_{\text{eff}}} . \quad (3.199)$$

Diese Gleichung ist für gegebene Quenchparameter eindeutig lösbar. Offensichtlich stimmen die Besetzungszahlen f_k der Quasiteilchen nach dem Quench gemäß (3.148) für eine betrachtete Wellenzahl k nicht mit der Besetzung gemäß der Fermi-Verteilungsfunktion (3.197) im thermischen System überein. Obige Gleichung fordert jedoch nur die Übereinstimmung der Energie des Systems nach dem Quench und des Systems im thermischen Gleichgewicht, d. h. es ist über alle Wellenzahlen k zu summieren. Der effektiven Temperatur kommt in diesem Zusammenhang somit die Rolle eines Fitparameters zu.

Die Aussagen in [41] in Bezug auf Thermalisierung beruhen auf der Untersuchung der Relaxationszeit und der Korrelationslänge. Diese wurden aus dem zeitlichen Verlauf der Autokorrelationsfunktion gemäß

$$C_{\text{auto}}^{xx}(t) \propto e^{-t/\tau} \quad (3.200)$$

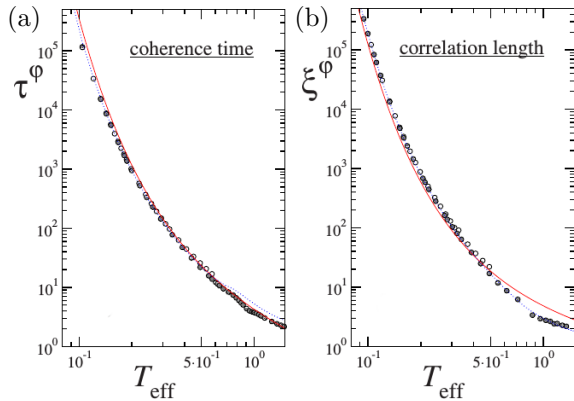


Abbildung 3.19: Aus dem asymptotischen Verlauf der Korrelationsfunktionen bestimmte Werte (a) der Relaxationszeit τ und (b) der Korrelationslänge ξ des transversalen Ising-Modells als Funktion der effektiven Temperatur T_{eff} nach Quenches des transversalen Felds hin zu $h = 0.5$. Die Symbole bezeichnen Werte von τ und ξ nach einem Quench, wobei nicht ausgefüllte Symbole Quenches mit $h_0 < h$ repräsentieren und ausgefüllte Symbole Quenches mit $h_0 > h$. Die durchgezogene rote Kurve bezeichnet die Werte für das System im Gleichgewicht bei der entsprechenden Temperatur und die blaue gestrichelte Kurve die Ergebnisse einer semiklassischen Rechnung für das System außerhalb des Gleichgewichts. Die Abbildungen wurden aus [41] entnommen. *Reprinted with permission from Rossini et al., Physical Review B 82, 144302, 2010. Copyright 2010 by the American Physical Society.*

und dem räumlichen Verlauf der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zu einem festen Zeitpunkt gemäß

$$C^{xx}(r, t) \propto e^{-r/\xi} \quad (3.201)$$

bestimmt und mit den Werten für das thermische System bei der ihm nach dem Quench zugeordneten effektiven Temperatur T_{eff} verglichen. Die Relaxationszeit und die Korrelationslänge für das thermische System wurden mithilfe von durch Sachdev und Young in [222] hergeleiteten Ausdrücken berechnet. Bei diesen handelt es sich um

$$\tau_T = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} e^{-\Lambda_k/T} |v_k| \right]^{-1} \quad (3.202)$$

für die Relaxationszeit und um

$$\xi_T = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} e^{-\Lambda_k/T} \right]^{-1} \quad (3.203)$$

für die Korrelationslänge. In Abbildung 3.19 sind die Resultate von Rossini *et al.* aus [41] für Quenches des transversalen Feldes hin zu $h = 0.5$ dargestellt. Sowohl für die Relaxationszeit als auch für die Korrelationslänge wurde eine recht gute Übereinstimmung gefunden. Eine ebenfalls durchgeführte semiklassische Analyse, bei der das Boltzmann-Gewicht $e^{-\Lambda_k/T}$ durch die Besetzungszahl f_k der Quasiteilchen ersetzt wurde, sodass sich die in den vorherigen Kapiteln hergeleiteten Formeln für die Relaxationszeit

$$\tau_Q = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k |v_k| \right]^{-1} \quad (3.204)$$

und die Korrelationslänge

$$\xi_Q = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} f_k \right]^{-1} \quad (3.205)$$

ergeben, zeigte eine weiter verbesserte Übereinstimmung (gestrichelte blaue Kurve in Abbildung 3.19). Dies führt zu dem Schluss, dass trotz der beobachteten guten Übereinstimmung zwischen der Relaxationszeit und der Korrelationslänge für das System nach dem Quench und das System im thermischen Gleichgewicht in der Tat durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble und nicht durch das kanonische Gibbs-Ensemble zu beschreiben ist. Die gute Übereinstimmung rührt daher, dass der exponentielle Abfall in der Zeit sowie der exponentielle räumliche Abfall mit einem einzelnen Fitparameter, der effektiven Temperatur, gut beschrieben werden kann. Bei der Beschreibung der Quasiperiodizität in endlichen Systemen hingegen werden sich Unterschiede ergeben, da für diese wie im Rahmen der semiklassischen Theorie

beschrieben die Besetzungszahlen aller Quasiteilchen entscheidend sind, um die unterschiedlichen Regime zu erklären und die Zeitentwicklung auch quantitativ exakt zu reproduzieren. Bei der Betrachtung der Darstellung des verallgemeinerten Gibbs-Ensembles in (1.32) zeigt sich, dass durch die Einführung einer effektiven Temperatur alle Lagrange-Multiplikatoren μ_k auf denselben durch T_{eff} bestimmten Wert gesetzt werden, dem System also Freiheitsgrade genommen werden. Dies hat im Falle der Relaxationszeit und der Korrelationslänge in [41] für niedrige effektive Temperaturen, d. h. schwache Quenchs, zu guten Ergebnissen geführt, ist aber im Allgemeinen nicht korrekt.

Im kanonischen Gibbs-Ensemble wird die Temperatur durch den einzelnen Lagrange-Multiplikator β definiert, der für vorgegebene Gesamtenergie im System unter der Nebenbedingung der Entropiemaximierung des Zustandes bestimmt wird. Für das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble existieren so viele Lagrange-Multiplikatoren wie es Erhaltungsgrößen im System gibt. In Analogie zur Definition der Temperatur im kanonischen Gibbs-Ensemble kann nun jeder Erhaltungsgröße eines integrablen Systems über ihren zugehörigen Lagrange-Multiplikator eine Temperatur zugeordnet werden. Im Falle freier Theorien ergibt sich somit für jede Mode eine effektive Temperatur. Die Herleitung der effektiven Temperaturen $T_{\text{eff},k}$ soll im Folgenden für das transversale Ising-Modell und das transversale XY-Modell in einer Dimension ausgeführt werden. Hierzu werden die mithilfe der semiklassischen Theorie für die Relaxationszeit und die Korrelationslänge hergeleiteten Ausdrücke mit den Ausdrücken von Sachdev und Young für das System im thermischen Gleichgewicht verglichen. Nach [45] ergibt sich

$$f_k = \exp\left(-\frac{\Lambda_k}{T_{\text{eff},k}}\right), \quad (3.206)$$

d. h. eine Verteilung der Quasiteilchen gemäß der Boltzmann-Statistik. Für die effektive Temperatur ergibt sich

$$T_{\text{eff},k} = -\frac{\Lambda_k}{\ln(f_k)}. \quad (3.207)$$

Ein Vergleich mit exakten Resultaten von Barouch *et al.* [63–65] für die Korrelationslänge des Systems bei endlicher Temperatur von

$$\xi_T = -\int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \ln\left(\left|\tanh\left(\frac{\Lambda_k}{2T}\right)\right|\right) \quad (3.208)$$

zu den exakten Resultaten von Calabrese, Essler und Fagotti in [47, 48] führt gemäß [45] zu

$$\ln(|\cos(\Delta_k)|) = \ln\left(\left|\tanh\left(\frac{\Lambda_k}{2T}\right)\right|\right). \quad (3.209)$$

Mit $f_k = \frac{1}{2}[1 - \cos(\Delta_k)]$ folgt hieraus nach [45, 68]

$$\min(f_k, 1 - f_k) = \frac{1}{e^{\Lambda_k/\tilde{T}_{\text{eff},k}} + 1} \quad (3.210)$$

und für die effektive Temperatur

$$\tilde{T}_{\text{eff},k} = -\frac{\Lambda_k}{\ln\left(\frac{\min(f_k, 1-f_k)}{\max(f_k, 1-f_k)}\right)}. \quad (3.211)$$

Die Besetzungszahl f_k der Quasiteilchen zur Wellenzahl k nach dem Quench bzw. $1 - f_k$ im Falle des zugehörigen Lochs folgt somit der Fermi-Verteilungsfunktion mit der von der Wellenzahl k abhängigen effektiven Temperatur $\tilde{T}_{\text{eff},k}$, stimmt also mit der Besetzungszahl im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur $\tilde{T}_{\text{eff},k}$ fermionischer Teilchen überein. Es wird erwartet, dass diese Beziehung für Freie-Fermionen-Modelle allgemeine Gültigkeit besitzt. Dies trägt weiter zu der Annahme bei, dass der stationäre Zustand des eindimensionalen transversalen Ising-Modells und des eindimensionalen transversalen XY-Modells durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann.

Insgesamt zeigt sich, dass für einen fest gewählten Endpunkt der Quenchs, d. h. feste Energien Λ_k der Quasiteilchen nach dem Quench, die effektive Temperatur jeder Mode mit der Quenchstärke zunehmen

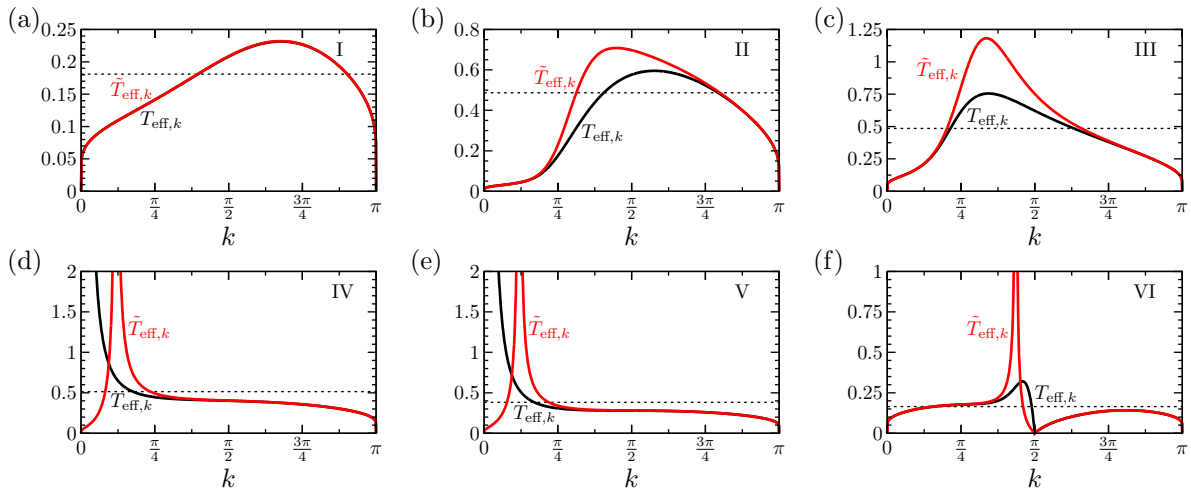


Abbildung 3.20: (a) - (f) Effektive Temperatur $T_{\text{eff},k}$ bestimmt mithilfe der semiklassischen Theorie gemäß (3.207) sowie $\tilde{T}_{\text{eff},k}$ bestimmt aus exakten Rechnungen gemäß (3.211) für die Quenchprotokolle I - VI. Während sich für den schwachen Quench in Quenchprotokoll I eine sehr gute Übereinstimmung zeigt, weisen die Kurvenverläufe für die stärkeren Quenches II und III innerhalb der ferromagnetischen Phase Abweichungen auf. Für die Quenchprotokolle IV und V über den Phasenübergang von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase bzw. umgekehrt sowie den Quench VI zum XX-Modell ohne Transversalfeld zeigen sich deutliche Abweichungen. Die gestrichelte Linie stellt die effektive Temperatur T_{eff} des Systems nach dem Quench gemäß Rossini *et al.* dar, die sich aus der Bestimmungsgleichung (3.195) ergibt.

muss, da durch stärkere Quenches mehr Quasiteilchen erzeugt werden und somit f_k zunimmt. Dies ist sowohl für die semiklassischen Resultate als auch für die exakten Resultate der Fall. Der Vergleich der semiklassischen Resultate für das thermische System zu den semiklassischen Resultaten für die Zeitentwicklung des Systems nach einem Quench hat eine Boltzmann-Verteilung der Quasiteilchen ergeben, während aus dem Vergleich der exakten Resultate eine Fermi-Verteilung folgt. Unterschiede zwischen den Verteilungen zeigen sich vor allem für kleine Verhältnisse $\Lambda_k/T_{\text{eff},k}$. Ist die effektive Temperatur hingegen klein gegenüber der Energie der Quasiteilchen, so gehen die Boltzmann- und die Fermi-Verteilung ineinander über. Es werden nun wiederum Quenches mit einem festen Endpunkt betrachtet, d. h. Λ_k ändert sich für die verschiedenen Quenches nicht. Da f_k mit der Quenchstärke zunimmt, muss auch $T_{\text{eff},k}$ zunehmen. Hierdurch nimmt das Verhältnis $\Lambda_k/T_{\text{eff},k}$ ab und infolgedessen die Abweichung zwischen der Boltzmann- und der Fermi-Verteilung zu. Es zeigt sich also auch hier, dass die semiklassische Beschreibung eine Näherung für den Fall kleiner Besetzungszahlen darstellt.

Abschließend soll der Verlauf der effektiven Temperatur als Funktion der Wellenzahl k für die Quenchprotokolle I - VI betrachtet werden. Hierbei werden die exakten Resultate für $\tilde{T}_{\text{eff},k}$ mit den semiklassischen Vorhersagen $T_{\text{eff},k}$ sowie der einzelnen effektiven Temperatur des Systems nach Rossini *et al.* verglichen. Die Resultate sind in Abbildung 3.20 dargestellt. Für den schwachen Quench in Quenchprotokoll I zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen $T_{\text{eff},k}$ und $\tilde{T}_{\text{eff},k}$. Für die beiden stärkeren Quenches II und III innerhalb der ferromagnetischen Phase zeigen sich Abweichungen der Verläufe von $T_{\text{eff},k}$ und $\tilde{T}_{\text{eff},k}$. Die auftretenden Unterschiede sind jedoch hauptsächlich quantitativer Natur und treten abseits der Intervallgrenzen $k = 0$ bzw. $k = \pi$ auf. Der qualitative Verlauf der Kurven stimmt überein. Für die Quenchprotokolle IV und V, die Quenches über den Phasenübergang von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase bzw. umgekehrt beschreiben, zeigen sich im Bereich kleiner Wellenzahlen deutliche Abweichungen zwischen $T_{\text{eff},k}$ und $\tilde{T}_{\text{eff},k}$. Während in beiden Fällen $T_{\text{eff},k}$ für $k \rightarrow 0$ divergiert, divergiert $\tilde{T}_{\text{eff},k}$ wie f_k für $k \rightarrow 0.373583$ und strebt für $k \rightarrow 0$ gegen null. Für Quenchprotokoll VI, welches das System hin zum XX-Modell ohne Transversalfeld überführt, zeigen sich ähnliche starke Abweichungen zwischen $T_{\text{eff},k}$ und $\tilde{T}_{\text{eff},k}$. Während für $k > \pi/2$ eine sehr gute Übereinstimmung besteht, weist $\tilde{T}_{\text{eff},k}$ für $k \approx 1.36944$ eine Divergenz auf, wohingegen $T_{\text{eff},k}$ endlich bleibt. Für kleine Werte von k stimmen die Kurvenverläufe wieder sehr gut überein.

3.7 Divergenz der Relaxationszeit und der Korrelationslänge

Nach Einführung der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k stimmen die mithilfe der semiklassischen Theorie hergeleiteten Ausdrücke für die Relaxationszeit und die Korrelationslänge mit den exakten Resultaten von Calabrese, Essler und Fagotti in [47, 48] überein. Im Falle der lokalen Magnetisierung ist die Relaxationszeit gegeben durch

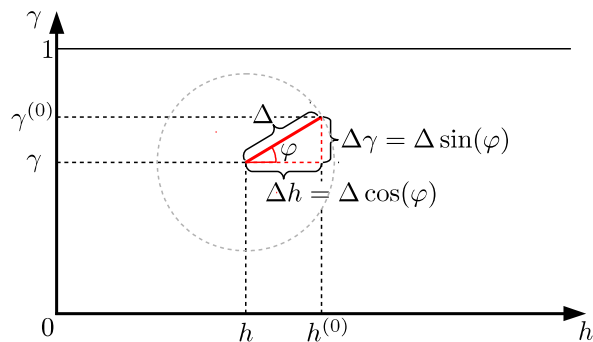
$$\tilde{\tau}_{\text{mag}} = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} |v_k| \tilde{f}_k \right]^{-1} \quad (3.212)$$

und die Korrelationslänge durch

$$\tilde{\xi}_{\text{mag}} = \left[2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \tilde{f}_k \right]^{-1} \quad (3.213)$$

mit der modifizierten Besetzungszahl \tilde{f}_k gemäß (3.188). Im Folgenden werden verschiedene Quenches mit einem festen Endpunkt betrachtet, d. h. für alle betrachteten Quenchprotokolle stimmt der Hamiltonoperator \hat{H} nach der Quench überein. Die Parameter des Hamiltonoperators \hat{H}_0 vor dem Quench werden variiert. Die Kopplungskonstante sei unter den Quenchs konstant, während die Anisotropie und die Stärke des externen transversalen Feldes durch die Quenchs verändert werden. Für $\hat{H}_0 \rightarrow \hat{H}$ verschwindet die Differenz Δ_k der Bogoliubov-Winkel, die \hat{H} und \hat{H}_0 diagonalisieren. Infolgedessen ist $\cos(\Delta_k) = 1$ und somit $\tilde{f}_k = 0$, d. h. es werden keine Quasiteilchen erzeugt, wodurch sowohl die Relaxationszeit als auch die Korrelationslänge divergieren. Der funktionale Zusammenhang dieser Divergenz zur Quenchstärke soll nun untersucht werden. Dabei sei $J_0 = J$, $\gamma_0 = \gamma + \Delta\gamma$ und $h_0 = h + \Delta h$. Die Quenchstärke ist dann definiert als $\Delta = \sqrt{(\Delta h)^2 + (\Delta\gamma)^2}$. Es erweist sich als vorteilhaft, Polarkoordinaten in der h - γ -Ebene zu verwenden, in der h auf der Abszisse und γ auf der Ordinate aufgetragen ist. Der Ursprung des Koordinatensystems in Polarkoordinaten wird durch die Parameter der Hamiltonoperatoren nach dem Quench bestimmt. Dann ist $\Delta\gamma = \Delta \sin(\varphi)$ und $\Delta h = \Delta \cos(\varphi)$. Dies ist in Abbildung 3.21 veranschaulicht.

Abbildung 3.21: Darstellung der Quenchstärke $\Delta = \sqrt{(\Delta\gamma)^2 + (\Delta h)^2}$ in der h - γ -Ebene. Betrachtet werden Quenchprotokolle, die alle den gleichen Endpunkt (h, γ) haben. Mithilfe der Polardarstellung $\Delta\gamma = \Delta \sin(\varphi)$ und $\Delta h = \Delta \cos(\varphi)$ können alle entsprechenden Quenchprotokolle identifiziert werden: Ihre Startpunkte liegen auf dem Kreis um (h, γ) mit Radius Δ .



Da die Geschwindigkeit der Quasiteilchen nur von den Parametern des Hamiltonoperators nach dem Quench abhängt, also von der Quenchstärke unabhängig ist, wird die Divergenz der Relaxationszeit wie die Divergenz der Korrelationslänge nur vom Verhalten von \tilde{f}_k für $\Delta \rightarrow 0$ bestimmt. Ausgehend von der Gleichung für \tilde{f}_k werden J_0 , γ_0 und h_0 durch J , γ und h sowie $\Delta\gamma$ und Δh ausgedrückt:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_k &= -\frac{1}{2} \ln \left\{ \left| \frac{h(h + \Delta h) + J^2 \gamma(\gamma + \Delta\gamma) - J(2h + \Delta h) \cos(k) + J^2(1 - \gamma(\gamma + \Delta\gamma)) \cos^2(k)}{\Lambda_k \sqrt{(h + \Delta h)^2 + J^2(\gamma + \Delta\gamma)^2 - 2J(h + \Delta h) \cos(k) + J^2(1 - (\gamma + \Delta\gamma)^2) \cos^2(k)}} \right| \right\} \\ &= -\frac{1}{2} \ln \{ |\Lambda_k^2 + (h - J \cos(k)) \Delta h + J^2 \gamma \sin^2(k) \Delta\gamma| \} + \frac{1}{2} \ln \{ \Lambda_k \} \\ &\quad + \frac{1}{4} \ln \{ \Lambda_k^2 + 2(h - J \cos(k)) \Delta h + 2J^2 \gamma \sin^2(k) \Delta\gamma + (\Delta h)^2 + J^2 \sin^2(k) (\Delta\gamma)^2 \} \end{aligned} \quad (3.214)$$

Bei den Umformungen wurde bei den Ausdrücken im Nenner ausgenutzt, dass die Energie der Quasiteilchen nicht negativ ist. Der finale Ausdruck für \tilde{f}_k in Abhängigkeit von Δh und $\Delta\gamma$ wird nun bis zur

zweiten Ordnung in $\Delta\gamma$ und Δh in eine Taylor-Reihe entwickelt:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_k \approx \tilde{f}_k \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} + \frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} \Delta h + \frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial(\Delta\gamma)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} \Delta\gamma + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)^2} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} (\Delta h)^2 \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta\gamma)^2} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} (\Delta\gamma)^2 + \frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)\partial(\Delta\gamma)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} (\Delta h)(\Delta\gamma). \end{aligned} \quad (3.215)$$

Für die einzelnen Summanden in dieser Entwicklung ergibt sich:

$$\tilde{f}_k \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = 0, \quad (3.216a)$$

$$\frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = 0, \quad (3.216b)$$

$$\frac{\partial \tilde{f}_k}{\partial(\Delta\gamma)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = 0, \quad (3.216c)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)^2} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = -\frac{(h - J \cos(k))^2}{2\Lambda_k^4} + \frac{1}{2\Lambda_k^2}, \quad (3.216d)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta\gamma)^2} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = -\frac{(J^2\gamma \sin^2(k))^2}{2\Lambda_k^4} + \frac{J^2 \sin^2(k)}{2\Lambda_k^2}, \quad (3.216e)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}_k}{\partial(\Delta h)\partial(\Delta\gamma)} \Big|_{\substack{\Delta h=0 \\ \Delta\gamma=0}} = -\frac{J^2\gamma \sin^2(k)(h - J \cos(k))}{2\Lambda_k^4}. \quad (3.216f)$$

Es verschwinden somit alle Beiträge bis zur zweiten Ordnung. Unter Ausnutzung der Polardarstellung von Δh und $\Delta\gamma$ folgt schließlich

$$\begin{aligned} \tilde{f}_k \approx \left(\frac{\Lambda_k^2 - (h - J \cos(k))^2}{4\Lambda_k^4} \cos^2(\varphi) + \frac{J^2 \sin^2(k)\Lambda_k^2 - (J^2\gamma \sin^2(k))^2}{4\Lambda_k^4} \sin^2(\varphi) \right. \\ \left. - \frac{J^2\gamma \sin^2(k)(h - J \cos(k))}{2\Lambda_k^4} \cos(\varphi) \sin(\varphi) \right) \Delta^2. \end{aligned} \quad (3.217)$$

Für die Divergenz der Relaxationszeit und der Korrelationslänge im Falle verschwindender Quenchstärke ergibt sich somit

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \tilde{\tau}_{\text{mag}} \propto \Delta^{-2} \quad (3.218)$$

und

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \tilde{\xi}_{\text{mag}} \propto \Delta^{-2}, \quad (3.219)$$

d. h. sowohl die Relaxationszeit als auch die Korrelationslänge divergieren quadratisch mit der Quenchstärke für $\Delta \rightarrow 0$. Für das transversale Ising-Modell mit $\gamma = \gamma_0 = 1$ ist die Quenchstärke Δ gerade durch die Änderung Δh des Transversalfeldes gegeben.

Abschließend sollen die mithilfe von (3.212) bzw. (3.213) bestimmten Werte für die Relaxationszeit und die Korrelationslänge des Systems nach einem Quench mit den aus der mithilfe der Freie-Fermionen-Technik exakt berechneten lokalen Magnetisierung bzw. gleichzeitigen Korrelationsfunktion gewonnenen Werten verglichen werden. Hierzu werden wie oben beschrieben Quenches betrachtet, die am gleichen Punkt der h - γ -Ebene enden und deren Startpunkte auf einer Geraden in der Ebene liegen, die den Winkel φ mit der h -Achse einschließt. Die Quenchstärke Δ , die den Abstand des Startpunktes vom Endpunkt entlang der Geraden angibt, wird variiert. Für Quenches mit einem beliebigen Endpunkt in der h - γ -Ebene, die nur das Transversalfeld ändern und die Anisotropie konstant halten, für die also $\varphi = 0$ ist, wurde in [216] bereits die Divergenz der Relaxationszeit und der Korrelationslänge mit Δ^{-2} gezeigt. Zum Nachweis der oben hergeleiteten Formel für Quenches, die sowohl das Transversalfeld als auch die Anisotropie ändern, sei nun $\varphi \neq 0$. Exemplarisch werden Quenches betrachtet, die am Punkt $J = 1$, $\gamma = 0.3$ und $h = 0.8$ enden und deren Startpunkte auf der Geraden mit $\varphi = 35^\circ$ liegen. Für diese ist der Verlauf der Relaxationszeit

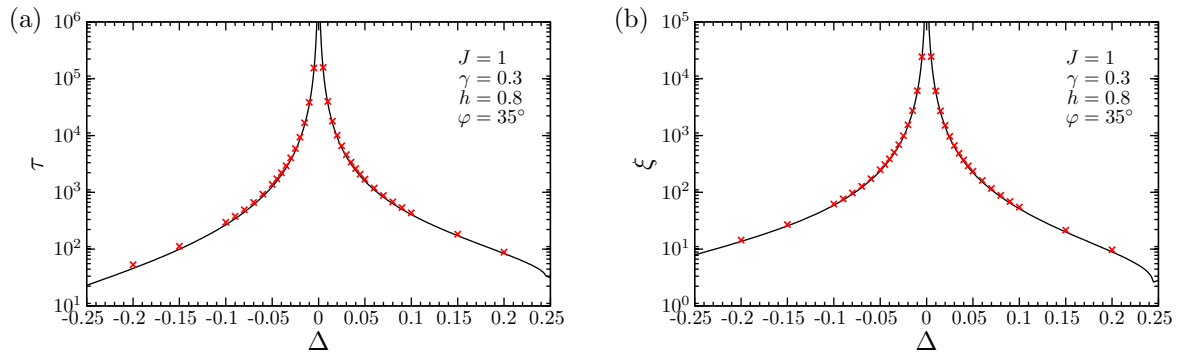


Abbildung 3.22: (a) Relaxationszeit und (b) Korrelationslänge für Quenches, die am Punkt $J = 1$, $\gamma = 0.3$ und $h = 0.8$ enden und deren Startpunkte auf der Geraden mit $\varphi = 35^\circ$ liegen, als Funktion der Quenchstärke Δ . Die Datenpunkte (\times) stellen die mithilfe von Least-Square-Fits aus dem zeitlichen Verlauf der lokalen Magnetisierung gewonnenen Werte für τ bzw. die aus dem Verlauf der gleichzeitigen Korrelationsfunktion als Funktion des Abstandes der Spins zu einem festen Zeitpunkt gewonnenen Werte für ξ dar, während es sich bei den kontinuierlichen Kurven um die Verläufe von τ und ξ gemäß (3.212) bzw. (3.213) handelt. Es zeigt sich in beiden Fällen für alle Werte von Δ eine sehr gute Übereinstimmung.

und der Korrelationslänge in Abbildung 3.22 in Abhängigkeit von der Quenchstärke Δ dargestellt. $\Delta < 0$ bezeichnet hierbei Quenches mit $\Delta h < 0$ und $\Delta\gamma < 0$. Zwischen den mithilfe von Least-Square-Fits aus dem zeitlichen Verlauf der lokalen Magnetisierung gewonnenen Werten für τ bzw. den aus dem Verlauf der gleichzeitigen Korrelationsfunktion als Funktion des Abstandes der Spins zu einem festen Zeitpunkt gewonnenen Werten für ξ und den Verläufen von τ und ξ gemäß (3.212) bzw. (3.213) zeigt sich für alle betrachteten Quenchstärken Δ eine sehr gute Übereinstimmung der Resultate. Es verbleibt noch die Untersuchung der Divergenz von τ und ξ für $\Delta \rightarrow 0$. Zu diesem Zweck sind in Abbildung 3.23 die Relaxationszeit und die Korrelationslänge für die oben beschriebenen Quenches in Abhängigkeit vom Betrag der Quenchstärke doppeltlogarithmisch aufgetragen. Für $\Delta \rightarrow 0$ zeigt sich sowohl für die Relaxationszeit τ als auch für die Korrelationslänge ξ eine Divergenz gemäß Δ^{-2} sowohl für $\Delta \rightarrow 0^+$ als auch für $\Delta \rightarrow 0^-$ in Übereinstimmung mit den Resultaten (3.218) und (3.219) der Entwicklung der Ausdrücke (3.212) und (3.213) für τ und ξ in Δ .

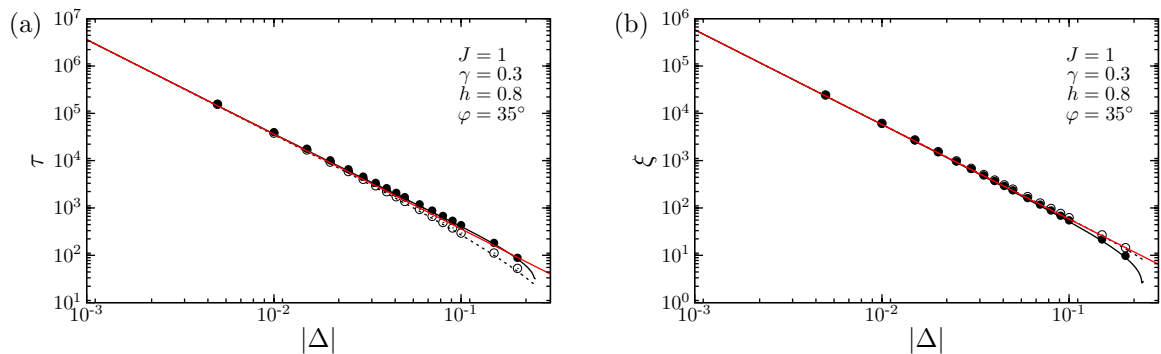


Abbildung 3.23: (a) Relaxationszeit und (b) Korrelationslänge für Quenches, die am Punkt $J = 1$, $\gamma = 0.3$ und $h = 0.8$ enden und deren Startpunkte auf der Geraden mit $\varphi = 35^\circ$ liegen, als Funktion des Betrages der Quenchstärke Δ . Die Auftragung erfolgt doppeltlogarithmisch, um die algebraische Divergenz von τ und ξ gemäß Δ^{-2} für $\Delta \rightarrow 0$ nachzuweisen. Bei den Datenpunkten handelt es sich um die Ergebnisse der Freie-Fermionen-Technik, wobei ausgefüllte Punkte Daten von Quenches mit $\Delta > 0$ und nicht ausgefüllte Punkte Daten von Quenches mit $\Delta < 0$ darstellen. Die schwarzen Kurven sind die Ergebnisse der Ausdrücke (3.212) bzw. (3.213) für τ bzw. ξ , wobei die durchgezogenen Linien Quenches mit $\Delta > 0$ und die gestrichelten Linien Quenches mit $\Delta < 0$ repräsentieren. Die rote Linie stellt einen Least-Square-Fit proportional zu Δ^{-2} dar. In allen Fällen zeigt sich für $\Delta \rightarrow 0$ eine sehr gute Übereinstimmung.

3.8 Änderung des Quenchprotokolls: Rückquench

Die bisherigen Betrachtungen haben sich mit Systemen befasst, deren Hamiltonoperator zum Zeitpunkt $t = 0$ durch einen Quench einmalig instantan von einem initialen Wert \hat{H}_0 zu einem finalen Wert \hat{H} geändert wurde. Nach dem Quench entwickelte sich der Zustand des Systems unitär in der Zeit gemäß der Schrödingergleichung. Die Zeitentwicklung wurde dabei bestimmt durch den Hamiltonoperator \hat{H} . Hierbei handelte es sich um die einfachste Form eines Quenchprotokolls. Das Quenchprotokoll kann beliebig erweitert werden, indem zu späteren Zeitpunkten weitere Quenchs durchgeführt werden. Im Folgenden soll die einfachste Erweiterung des Quenchprotokolls untersucht werden: Nachdem zum Zeitpunkt $t = 0$ der Hamiltonoperator des Systems von \hat{H}_0 zu \hat{H} geändert wurde, soll dies zum Zeitpunkt $t = t' > 0$ wieder rückgängig gemacht werden. Der zweite Quench zum Zeitpunkt $t = t'$ wird aus diesem Grund auch als *Rückquench* bezeichnet. Es ergibt sich somit das folgende Quenchprotokoll:

$$\hat{H}_0 \xrightarrow{t=0} \hat{H} \xrightarrow{t=t'} \hat{H}_0 . \quad (3.220)$$

Wie bei den bisher betrachteten Quenchs soll das System vor dem ersten Quench zum Zeitpunkt $t = 0$ im Grundzustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ des initialen Hamiltonoperators \hat{H}_0 präpariert sein. Der Zustand des Systems zu einem beliebigen Zeitpunkt $t > 0$ ist dann gegeben durch

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{cases} e^{-i\hat{H}t} |\Psi_0^{(0)}\rangle & , \text{ falls } t \leq t' \\ e^{-i\hat{H}_0(t-t')} e^{-i\hat{H}t'} |\Psi_0^{(0)}\rangle & , \text{ falls } t \geq t' \end{cases} . \quad (3.221)$$

Für Zeiten $t \leq t'$ unterscheidet sich die Zeitentwicklung somit nicht von der im bislang betrachteten Quenchprotokoll. Im Folgenden werden wiederum die zuvor eingeführten Observablen betrachtet. Hierbei wird das Hauptaugenmerk auf der lokalen Magnetisierung und der Verschränkungsentropie liegen.

3.8.1 Freie-Fermionen-Technik

Zunächst soll die Berechnung der Observablen mithilfe der Freie-Fermionen-Technik erläutert werden. Diese wird im Heisenbergbild ausgeführt, in dem die Zeitentwicklung eines beliebigen Operators \hat{O} nach dem beschriebenen Quenchprotokoll lautet

$$\hat{O}(t) = \begin{cases} e^{i\hat{H}t} \hat{O} e^{-i\hat{H}t} & , \text{ falls } t \leq t' \\ e^{i\hat{H}t} e^{i\hat{H}_0(t-t')} \hat{O} e^{-i\hat{H}_0(t-t')} e^{-i\hat{H}t'} & , \text{ falls } t \geq t' \end{cases} . \quad (3.222)$$

Es werde zunächst die Zeitentwicklung der x -Komponente des Pauli-Spinoperators an einer Position ℓ der Kette betrachtet. Diese ist zur Berechnung der Korrelationsfunktionen und der lokalen Magnetisierung erforderlich. Hierzu wird die Darstellung von $\hat{\sigma}_\ell^x$ über die Majorana-Fermioperatoren verwendet gemäß (3.96)

$$\hat{\sigma}_\ell^x(t) = i^{\ell-1} \prod_{i=1}^{2\ell-1} \check{a}_i(t) . \quad (3.223)$$

Die Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren für $t \leq t'$ und $t \geq t'$ wird im Folgenden bestimmt.

- $t \leq t'$

Für $t \leq t'$ ergibt sich die bekannte Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren nach (3.103)

$$\check{a}_i(t) = \sum_{j=1}^{2N} P_{i,j}(t) \check{a}_j , \quad i = 1, \dots, 2N \quad (3.224)$$

mit den in (3.102a) bis (3.102d) angegebenen Zeitentwicklungskoeffizienten. Die Zeitentwicklung von $\hat{\sigma}_\ell^x$ kann somit geschrieben werden in der Form

$$\hat{\sigma}_\ell^x(t) = i^{\ell-1} \prod_{i=1}^{2\ell-1} \sum_{j=1}^{2N} P_{i,j}(t) \check{a}_j . \quad (3.225)$$

- $t \geq t'$

Für $t \geq t'$ ergibt sich für die Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren

$$\begin{aligned}
 \check{a}_i(t) &= e^{i\hat{H}t'} e^{i\hat{H}_0(t-t')} \check{a}_i e^{-i\hat{H}_0(t-t')} e^{-i\hat{H}t'} \\
 &= e^{i\hat{H}t'} \left(\sum_{k=1}^{2N} P_{i,k}^{(0)}(t-t') \check{a}_k \right) e^{-i\hat{H}t'} \\
 &= \sum_{k=1}^{2N} P_{i,k}^{(0)}(t-t') \underbrace{e^{i\hat{H}t'} \check{a}_k e^{-i\hat{H}t'}}_{\check{a}_k(t')} \\
 &= \sum_{k=1}^{2N} P_{i,k}^{(0)}(t-t') \sum_{j=1}^{2N} P_{k,j}(t') \check{a}_j \\
 &= \sum_{j=1}^{2N} \sum_{k=1}^{2N} \underbrace{P_{i,k}^{(0)}(t-t') P_{k,j}(t')}_{\tilde{P}_{i,j}(t,t')} \check{a}_j \\
 &= \sum_{j=1}^{2N} \tilde{P}_{i,j}(t,t') \check{a}_j, \quad i = 1, \dots, 2N.
 \end{aligned} \tag{3.226}$$

Die Zeitentwicklungskoeffizienten $P_{i,j}^{(0)}(t-t')$ ($i, j = 1, \dots, 2N$) ergeben sich in Analogie zu den Zeitentwicklungskoeffizienten $P_{i,j}(t)$ in (3.102a) bis (3.102d) zu

$$P_{2m-1,2n-1}^{(0)}(t-t') = \sum_k \phi_k^{(0)}(m) \phi_k^{(0)}(n) \cos(\Lambda_k^{(0)}(t-t')), \tag{3.227a}$$

$$P_{2m-1,2n}^{(0)}(t-t') = - \sum_k \phi_k^{(0)}(m) \psi_k^{(0)}(n) \sin(\Lambda_k^{(0)}(t-t')), \tag{3.227b}$$

$$P_{2m,2n-1}^{(0)}(t-t') = \sum_k \psi_k^{(0)}(m) \phi_k^{(0)}(n) \sin(\Lambda_k^{(0)}(t-t')), \tag{3.227c}$$

$$P_{2m,2n}^{(0)}(t-t') = \sum_k \psi_k^{(0)}(m) \psi_k^{(0)}(n) \cos(\Lambda_k^{(0)}(t-t')) \tag{3.227d}$$

mit $m, n = 1, \dots, N$. Aus der Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren folgt für $\hat{\sigma}_\ell^x(t)$

$$\hat{\sigma}_\ell^x(t) = i^{\ell-1} \prod_{i=1}^{2\ell-1} \sum_{j=1}^{2N} \tilde{P}_{i,j}(t,t') \check{a}_j. \tag{3.228}$$

Der Struktur der Ausdrücke für die Zeitentwicklung der Majorana-Fermioperatoren und somit auch die der x -Komponente der Pauli-Spinoperatoren für $t \leq t'$ und für $t \geq t'$ stimmen überein. Für Zeiten $t \geq t'$ sind lediglich die Zeitentwicklungskoeffizienten $P_{i,j}(t)$ der Majorana-Fermioperatoren durch die Zeitentwicklungskoeffizienten

$$\tilde{P}_{i,j}(t,t') := \sum_{k=1}^{2N} P_{i,k}^{(0)}(t-t') P_{k,j}(t') \tag{3.229}$$

zu ersetzen. Somit kann sowohl für Zeiten $t \leq t'$ als auch für Zeiten $t \geq t'$ das Wicksche Theorem in der gleichen Weise angewendet werden wie für das bislang betrachtete Quenchprotokoll. Die Korrelationsfunktionen und die lokale Magnetisierung können als Pfaffsche Determinanten wie in (3.107), (3.108) sowie (3.120) geschrieben werden. Die Darstellung (3.125) der Verschränkungsentropie bleibt ebenfalls unverändert. Bei der Bestimmung der Einträge

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle, \tag{3.230a}$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.230b)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \hat{\eta}_{k_0}^\dagger | \Psi_0^{(0)} \rangle \quad (3.230c)$$

der Pfaffschen Determinanten bzw. der Matrix Γ ist lediglich zwischen $t \leq t'$ und $t \geq t'$ zu unterscheiden. Für $t \leq t'$ können unmittelbar die bisherigen Resultate aus (3.114), (3.116) und (3.124) übernommen werden. Für $t \geq t'$ sind die Resultate zu modifizieren gemäß

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} \tilde{P}_{i,m}(t, t') \sum_{n=1}^{2N} \tilde{P}_{j,n}(t, t') \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \check{a}_n | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.231a)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} \tilde{P}_{i,m}(t, t') \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \check{a}_j | \Psi_0^{(0)} \rangle , \quad (3.231b)$$

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle = \sum_{m=1}^{2N} \tilde{P}_{i,m}(t, t') \langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_m \hat{\eta}_{k_0}^{(0)\dagger} | \Psi_0^{(0)} \rangle . \quad (3.231c)$$

In den Ausdrücken (3.114), (3.116) und (3.124) ist somit für $t \leq t'$ lediglich $P_{i,j}(t)$ durch $\tilde{P}_{i,j}(t, t')$ zu ersetzen. Der Erwartungswert $\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle$ soll noch genauer betrachtet werden. Für das einfache Quenchprotokoll bzw. für $t \leq t'$ wird er nach (3.114) in der Form

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} + i\Gamma_{i,j}(t) \quad (3.232)$$

geschrieben mit

$$\Gamma_{i,j}(t) = \sum_{m,n=1}^N [G_{n,m}^{(0)} P_{i,2m-1}(t) P_{j,2n}(t) - G_{m,n}^{(0)} P_{i,2m}(t) P_{j,2n-1}(t)] \quad (3.233)$$

nach (3.115). Für $t \geq t'$ sei nun

$$\langle \Psi_0^{(0)} | \check{a}_i(t) \check{a}_j(t) | \Psi_0^{(0)} \rangle = \delta_{ij} + i\tilde{\Gamma}_{i,j}(t, t') . \quad (3.234)$$

Dabei ist

$$\tilde{\Gamma}_{i,j}(t, t') = \sum_{m,n=1}^N [G_{n,m}^{(0)} \tilde{P}_{i,2m-1}(t, t') \tilde{P}_{j,2n}(t, t') - G_{m,n}^{(0)} \tilde{P}_{i,2m}(t, t') \tilde{P}_{j,2n-1}(t, t')] . \quad (3.235)$$

Unter Beachtung von (3.229) kann $\tilde{\Gamma}_{i,j}(t, t')$ auch über die $\Gamma_{i,j}(t')$ ausgedrückt werden in der Form

$$\tilde{\Gamma}_{i,j}(t, t') = \sum_{m,n=1}^{2N} P_{i,m}^{(0)}(t, t') P_{j,n}^{(0)}(t, t') \Gamma_{m,n}(t') . \quad (3.236)$$

Mithilfe der berechneten Erwartungswerte können die Korrelationsfunktionen, die lokale Magnetisierung und die Verschränkungsentropie für das modifizierte Quenchprotokoll zu beliebigen Zeiten vor und nach dem Rückquench bestimmt werden.

3.8.2 Semiklassische Theorie

Nach der Berechnung der Korrelationsfunktionen, der lokalen Magnetisierung sowie der Verschränkungsentropie nach dem Rückquench mithilfe der Freie-Fermionen-Technik soll nun die semiklassische Theorie an das modifizierte Quenchprotokoll angepasst werden. Für Zeiten $t \leq t'$ kann die bislang verwendete semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses unverändert übernommen werden. Änderungen ergeben sich erst für Zeiten $t \geq t'$. Durch den Rückquench werden die Erhaltungsgrößen des Systems geändert. Dies betrifft sowohl die Energie als auch die Besetzungszahl der Quasiteilchen. Nach dem Rückquench werden die Energie und somit auch die Geschwindigkeit der Quasiteilchen durch den Hamiltonoperator \hat{H}_0 bestimmt. Es ist

$$\Lambda_k^{(0)} = \sqrt{h_0^2 + J_0^2 \gamma_0^2 - 2J_0 h_0 \cos(k) + J_0^2 (1 - \gamma_0^2) \cos^2(k)} \quad (3.237)$$

und die Geschwindigkeit der Quasiteilchen zur Wellenzahl k beträgt

$$v_k^{(0)} = \frac{\partial \Lambda_k^{(0)}}{\partial k} = \frac{J_0 h_0}{\Lambda_k^{(0)}} . \quad (3.238)$$

Weiterhin wird durch den Rückquench die Besetzungszahl der Quasiteilchen geändert. Die Erwartungswerte von $\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k$ für die verschiedenen Wellenzahlen k sind nach dem Rückquench keine Erhaltungsgrößen mehr. Gemäß der Definition der Besetzungszahl der Quasiteilchen ergibt sich nun

$$f_k^{(0)}(t') = \langle \Psi(t') | \hat{\eta}_k^{(0)\dagger} \hat{\eta}_k^{(0)} | \Psi(t') \rangle . \quad (3.239)$$

Die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Rückquench ist also vom Zustand des Systems zum Zeitpunkt t' des Rückquenchs abhängig. Um analytische Ausdrücke in Abhängigkeit von den Quenchparametern zu erhalten, werden die Berechnungen für das System mit periodischen Randbedingungen ausgeführt. Zur Bestimmung von $f_k^{(0)}(t')$ werden zunächst die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und die $\hat{\eta}_k^{(0)}$ gemäß

$$\hat{\eta}_k^{(0)\dagger} = \mathcal{U}_k \hat{\eta}_k^\dagger - \imath \mathcal{V}_k \hat{\eta}_{-k} , \quad (3.240a)$$

$$\hat{\eta}_k^{(0)} = \mathcal{U}_k \hat{\eta}_k + \imath \mathcal{V}_k \hat{\eta}_{-k}^\dagger \quad (3.240b)$$

über die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und die $\hat{\eta}_k$ ausgedrückt, um die Zeitentwicklung im Heisenbergbild gemäß (3.90a) und (3.90b) auszuführen. Anschließend werden die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und die $\hat{\eta}_k$ wieder mithilfe von (3.146a) und (3.146b) auf die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und die $\hat{\eta}_k^{(0)}$ zurücktransformiert, um die Erwartungswerte im Zustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ bestimmen zu können. Es ergibt sich schließlich

$$f_k^{(0)}(t') = 4 \mathcal{U}_k^2 \mathcal{V}_k^2 \sin^2(\Lambda_k t') = \left[1 - \frac{(h - J \cos(k))(h_0 - J_0 \cos(k)) + J J_0 \gamma \gamma_0 \sin^2(k)}{\Lambda_k \Lambda_k^{(0)}} \right] \sin^2(\Lambda_k t') . \quad (3.241)$$

Mithilfe von

$$\mathcal{U}_k^2 = \cos^2\left(\frac{\Delta_k}{2}\right) = \frac{1}{2} [1 + \cos(\Delta_k)] \quad (3.242)$$

aus (3.149a) und

$$\mathcal{V}_k^2 = \sin^2\left(\frac{\Delta_k}{2}\right) = \frac{1}{2} [1 - \cos(\Delta_k)] . \quad (3.243)$$

aus (3.149b) kann die Besetzungszahl $f_k^{(0)}(t')$ der Quasiteilchen nach dem Quench über die Differenz der Bogoliubov-Winkel ausgedrückt werden gemäß

$$f_k^{(0)}(t') = \sin^2(\Delta_k) \sin^2(\Lambda_k t') . \quad (3.244)$$

Ausgedrückt über die Besetzungszahl der Quasiteilchen vor dem Quench ist

$$f_k^{(0)}(t') = 4 f_k (1 - f_k) \sin^2(\Lambda_k t') . \quad (3.245)$$

Für ein betrachtetes k kann die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Rückquench in Abhängigkeit vom Zeitpunkt t' des Rückquenchs Werte zwischen 0 und $\sin^2(\Delta_k)$ annehmen. $\sin^2(\Delta_k)$ definiert somit eine Einhüllende für den Verlauf der $f_k^{(0)}(t')$ als Funktion der Wellenzahl k . Alternativ kann die Zeitentwicklung des Zustandes des Systems bis zum Zeitpunkt t' des Rückquenchs auch explizit berechnet werden. Hierzu wird wiederum das System mit periodischen Randbedingungen betrachtet. Ausgangspunkt bildet die Schrödingergleichung, die für eine beliebige Zeit $t \leq t'$ lautet

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\imath \hat{H} t} |\Psi_0^{(0)}\rangle . \quad (3.246)$$

Im ersten Schritt der Berechnung wird der Hamiltonoperator \hat{H} über die fermionischen Teilchenzahloperatoren $\hat{n}_k = \hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k$ ausgedrückt. Anschließend wird die Exponentialfunktion in Reihendarstellung entwickelt. Hierbei wird ausgenutzt, dass $\hat{n}_k^2 = 1$ ist. Zur Bestimmung der Wirkung der Operatoren auf

den Anfangszustand $|\Psi_0^{(0)}\rangle$ werden die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und die $\hat{\eta}_k$ mithilfe von (3.146a) und (3.146b) in Termen der $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und der $\hat{\eta}_k^{(0)}$ geschrieben. Es ergibt sich damit schließlich

$$|\Psi(t)\rangle = \prod_{k>0} \left(\mathcal{U}_k^2 e^{i\Lambda_k t} + \mathcal{V}_k^2 e^{-i\Lambda_k t} - 2\mathcal{U}_k \mathcal{V}_k \sin(\Lambda_k t) \hat{\eta}_k^{(0)\dagger} \hat{\eta}_{-k}^{(0)\dagger} \right) |\Psi_0^{(0)}\rangle \quad (3.247)$$

bzw. ausgedrückt über die Differenz der Bogoliubov-Winkel

$$|\Psi(t)\rangle = \prod_{k>0} \left(\cos(\Lambda_k t) + i \cos(\Delta_k) \sin(\Lambda_k t) - \sin(\Delta_k) \sin(\Lambda_k t) \hat{\eta}_k^{(0)\dagger} \hat{\eta}_{-k}^{(0)\dagger} \right) |\Psi_0^{(0)}\rangle . \quad (3.248)$$

Mithilfe der Darstellung von $|\Psi(t')\rangle$ kann die Besetzungszahl $f_k^{(0)}(t')$ der Quasiteilchen nach dem Rückquench unmittelbar bestimmt werden. Es wurde bereits erwähnt, dass die Erwartungswerte der $\hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k$ nach dem Rückquench keine Erhaltungsgrößen mehr darstellen. Für Zeiten $t \geq t'$ ist

$$f_k(t) = \langle \Psi_0^{(0)} | e^{i\hat{H}t'} e^{i\hat{H}_0(t-t')} \hat{\eta}_k^\dagger \hat{\eta}_k e^{-i\hat{H}_0(t-t')} e^{-i\hat{H}t'} | \Psi_0^{(0)} \rangle \quad (3.249)$$

Dieser Erwartungswert kann auf die gleiche Weise berechnet werden wie zuvor beschrieben durch Transformationen zwischen den Darstellungen über die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ und die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$. Es ergibt sich schließlich

$$f_k(t) = f_k(1 - 2(1 - f_k) \sin(2\Lambda_k t') \sin(2\Lambda_k^{(0)}(t - t'))) . \quad (3.250)$$

$f_k^{(0)}(t')$ gibt die Gesamtbesetzungszahl der Quasiteilchen zur Wellenzahl k nach dem Rückquench an. Ein Vergleich mit f_k zeigt, dass durch den Rückquench somit in Abhängigkeit von t' die Besetzungszahl der Quasiteilchen zu einer Wellenzahl k erhöht oder erniedrigt werden kann. $f_k^{(0)}(t')$ enthält keine Information darüber, welcher Anteil der Quasiteilchen durch den ersten Quench und welcher durch den Rückquench erzeugt wurde. Dies zeigt die Problematik der Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems nach dem Rückquench mithilfe der semiklassischen Theorie. Die Argumentation der semiklassischen Theorie beruht darauf, dass Quasiteilchen zur selben Wellenzahl k , die an derselben Position erzeugt wurden, verschränkt sind. Wie in den vorangegangenen Kapiteln erläutert wurde, trägt ein Quasiteilchenpaar zur Wellenzahl k , das an einer Position x_0 der Kette erzeugt wurde, genau dann zur Korrelationsfunktion zweier Spins an den Positionen r_1 und r_2 zu den Zeiten t_1 und t_2 bei, wenn die Anzahl der Schnittpunkte zwischen den Trajektorien der Quasiteilchen des Paares und der Verbindungslinie zwischen den Punkten (r_1, t_1) und (r_2, t_2) im Raum-Zeit-Diagramm ungerade ist. Ein Beitrag zur Verschränkungsentropie zu einem betrachteten Zeitpunkt hingegen besteht genau dann, wenn sich ein Quasiteilchen des Paares in Subsystem A und das andere Quasiteilchen in Subsystem B befindet. Es ist nicht bekannt, welchen Effekt der Rückquench auf die Verschränkung bereits bestehender Quasiteilchenpaare hat. Zudem ist nicht bekannt, wie sich die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Rückquench zusammensetzt aus Quasiteilchen, die durch den ersten Quench erzeugt wurden, und Quasiteilchen, die durch den Rückquench erzeugt wurden. Aus diesem Grund kann mithilfe der semiklassischen Theorie die Verschränkungsentropie nach dem Rückquench nicht beschrieben werden.

Bei Betrachtung von Korrelationsfunktionen und der lokalen Magnetisierung ergeben sich aus den gleichen Gründen Probleme bei der Beschreibung der Quasiperiodizität im Falle endlicher Systemgröße, da für hinreichend große Zeiten ein Quasiteilchen eine Position der Kette mehrmals passiert. Wird jedoch das System im thermodynamischen Limes untersucht, so kann im Falle periodischer Randbedingungen ein Quasiteilchen eine Position der Kette nur ein einziges Mal passieren. Weiterhin passieren die Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares während ihrer Bewegung durch die Kette nur unterschiedliche Positionen, sodass für periodische Randbedingungen im thermodynamischen Limes insgesamt jede Position der Kette nur ein einziges Mal von einem Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares passiert wird. Für freie Randbedingungen kann durch geeignete Wahl der Positionen der betrachteten Spins innerhalb der Kette eine entsprechende Situation geschaffen werden. Bei Betrachtung der Autokorrelationsfunktion oder der lokalen Magnetisierung ist die Position des Spins dazu in der Mitte der Kette zu wählen bzw. bei der Untersuchung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion ist die Bulk-Korrelationsfunktion zu betrachten. Da im Rahmen der Numerik nur endliche Systemgrößen simuliert werden können, ergibt sich eine Beschränkung für die Zeiten, bis zu denen die semiklassische Theorie nach dem Rückquench angewandt werden kann. Die Zeitobergrenze ist durch die Bedingung gegeben, dass von jedem Quasiteilchenpaar

nur ein Quasiteilchen nur einziges Mal einen Beitrag zu betrachteten Observable liefert. Für die lokale Magnetisierung, deren Verlauf im Folgenden für das System mit freien Randbedingungen an der Position in der Kettenmitte nach dem Rückquench betrachtet werden wird, bedeutet dies, dass für alle k

$$|v_k|t' + |v_k^{(0)}|(t - t') \leq \frac{L}{2} \quad (3.251)$$

sein muss. $|v_k|t'$ bezeichnet dabei die Strecke, die Quasiteilchen zur Wellenzahl k bis zum Zeitpunkt t' des Rückquenchs zurückgelegt haben, und $|v_k^{(0)}|(t - t')$ die Strecke, die nach dem Rückquench zurückgelegt wurde. Durch die Wahl hinreichend kleiner Zeiten müssen Quasiteilchen, die die relevanten Positionen der Kette bereits passiert haben, nicht mehr berücksichtigt werden. Der Einfluss des Rückquenchs auf ihre Besetzungszahl und ihre Verschränkung ist somit unerheblich. Der Rückquench kann dann wie ein isolierter Quench beschrieben werden, wobei die Besetzungszahl der Quasiteilchen gegeben ist durch $f_k^{(0)}(t')$ und ihre Geschwindigkeit durch $v_k^{(0)}$.

3.8.3 Thermodynamischer Limes

Bevor die Zeitentwicklung des Systems nach dem Rückquench konkret berechnet wird, soll im thermodynamischen Limes in Analogie zum Vorgehen von Calabrese, Essler und Fagotti in [47] ein analytischer Ausdruck für die Korrelationsfunktion nach dem Rückquench und hieraus wie bereits für das einfache Quenchprotokoll eine modifizierte Besetzungszahl der Quasiteilchen bestimmt werden. Die Herleitungen in [47] wurden für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zweier Spins mit Abstand r im transversalen Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen durchgeführt, besitzen aber ebenso Gültigkeit für das transversale XY-Modell, da die Diagonalgestalt der beiden Hamiltonoperatoren übereinstimmt und sich lediglich die Eigenenergien der einzelnen Moden unterscheiden. Im Folgenden werde die Notation von Calabrese, Essler und Fagotti verwendet. Die gleichzeitige Korrelationsfunktion kann, wie bereits gezeigt wurde, als Pfaffsche Determinante geschrieben werden. Für das Modell mit periodischen Randbedingungen ist die schiefsymmetrische Matrix von der Gestalt

$$\bar{\Gamma} = \begin{bmatrix} \Gamma_0 & \Gamma_{-1} & \dots & \Gamma_{1-r} \\ \Gamma_1 & \Gamma_0 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \Gamma_{r-1} & \dots & \dots & \Gamma_0 \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \Gamma_n = \begin{pmatrix} -f_n & g_n \\ -g_{-n} & f_n \end{pmatrix}. \quad (3.252)$$

Auf eine explizite Angabe der Zeitabhängigkeit wird hierbei verzichtet. Die Matrix $\bar{\Gamma}$ ist eine Block-Toeplitz-Matrix, da jeder der 2×2 -Blöcke Γ_n nur von der Differenz der Reihen- und Spaltenindizes abhängt. Die Einträge der Γ_n sind gegeben durch

$$f_n + i\delta_{n0} := i \langle \check{a}_\ell^x \check{a}_{\ell+n}^x \rangle_t = i \langle \check{a}_{\ell+n}^y \check{a}_\ell^y \rangle_t, \quad (3.253a)$$

$$g_n := i \langle \check{a}_\ell^x \check{a}_{\ell+n-1}^y \rangle_t, \quad (3.253b)$$

wobei es sich bei den \check{a}_i^x und \check{a}_i^y mit

$$\check{a}_i^x := \hat{c}_i^\dagger + \hat{c}_i, \quad (3.254a)$$

$$\check{a}_i^y := i(\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i). \quad (3.254b)$$

um eine alternative Darstellung der Majorana-Fermioperatoren handelt. Im Vergleich zu der Definition der Majorana-Fermioperatoren in (3.95) ist

$$\check{a}_i^x = \check{a}_{2i-1}, \quad (3.255a)$$

$$\check{a}_i^y = -\check{a}_{2i} \quad (3.255b)$$

für $i = 1, \dots, N$. Die Referenzposition ℓ bei der Berechnung der Einträge von Γ_n kann für das Modell mit periodischen Randbedingungen beliebig gewählt werden. Die Matrix $\bar{\Gamma}$ wird über ihre Fourier-Transformierte ausgedrückt. Dazu werden die Fourier-Transformierten der einzelnen Blöcke Γ_n verwendet mit

$$\Gamma_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{v n k} \hat{\Gamma}(k) \quad \text{mit} \quad \hat{\Gamma}(k) = \begin{pmatrix} -f(k) & g(k) \\ -g(-k) & f(k) \end{pmatrix}. \quad (3.256)$$

Diese Form der Fourier-Transformierten ergibt sich unmittelbar durch Auswertung der Einträge. In [47] wurden die $f(k)$ und die $g(k)$ bestimmt zu

$$f(k) = \iota \sin(\Delta_k) \sin(2\Lambda_k t) , \quad (3.257a)$$

$$g(k) = -e^{\iota(\theta_k - k)} [\cos(\Delta_k) - \iota \sin(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t)] . \quad (3.257b)$$

Für das modifizierte Quenchprotokoll entspricht dies Zeiten vor dem Rückquench, d. h. $t \leq t'$. Für Zeiten $t \geq t'$ ergibt eine analoge Rechnung

$$f(k) = \iota \sin(\Delta_k) \sin(2\Lambda_k t') \cos(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) - \iota \cos(\Delta_k) \sin(\Delta_k) \{1 - \cos(2\Lambda_k t')\} \sin(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) , \quad (3.258a)$$

$$g(k) = -e^{\iota(\theta_k^{(0)} - k)} \left[\cos^2(\Delta_k) + \sin^2(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t') + \iota \sin(\Delta_k) \sin(2\Lambda_k t') \sin(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) + \iota \cos(\Delta_k) \sin(\Delta_k) \{1 - \cos(2\Lambda_k t')\} \cos(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) \right] . \quad (3.258b)$$

Im Rahmen der Rechnungen wird wiederum die Transformationen zwischen den Darstellungen über die $\hat{\eta}_k^\dagger$ und $\hat{\eta}_k$ sowie die $\hat{\eta}_k^{(0)\dagger}$ und $\hat{\eta}_k^{(0)}$ ausgenutzt, um Zeitentwicklungen und Grundzustandserwartungswerte berechnen zu können. Mithilfe der Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\iota \\ \iota & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.259)$$

kann $\hat{\Gamma}(k)$ vor dem Rückquench geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}(k) &= \iota \sin(\Delta_k) [\cos(\theta_k - k) \sigma_x - \sin(\theta_k - k) \sigma_y] \cos(2\Lambda_k t) \\ &\quad - \iota \sin(\Delta_k) \sigma_z \sin(2\Lambda_k t) \\ &\quad - \iota \cos(\Delta_k) [\cos(\theta_k - k) \sigma_y + \sin(\theta_k - k) \sigma_x] \end{aligned} \quad (3.260)$$

und nach dem Rückquench als

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}(k) &= -\iota \sin(\Delta_k) \left[\cos(\Delta_k) \{1 - \cos(2\Lambda_k t')\} \{ \cos(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_x - \sin(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_y \} \right. \\ &\quad \left. + \sin(2\Lambda_k t') \sigma_z \right] \cos(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) \\ &\quad - \iota \sin(\Delta_k) \left[\sin(2\Lambda_k t') \{ \cos(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_x - \sin(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_y \} \right. \\ &\quad \left. - \cos(\Delta_k) \{1 - \cos(2\Lambda_k t')\} \sigma_z \right] \sin(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) \\ &\quad - \iota \{ \cos^2(\Delta_k) + \sin^2(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t') \} \{ \cos(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_y + \sin(\theta_k^{(0)} - k) \sigma_x \} . \end{aligned} \quad (3.261)$$

Die Aussagen von Calabrese, Essler und Fagotti in [47] besitzen Gültigkeit für allgemeine Block-Töplitz-Matrizen, deren Blöcke von der Dimension 2×2 sind und für die $\hat{\Gamma}(k)$ geschrieben werden kann in der Form

$$\begin{aligned} \hat{t}(k) &= n_x(k) \sigma_x^{(k)} + \vec{n}_\perp(k) \cdot \vec{\sigma}^{(k)} e^{2\iota \Lambda_k t \sigma_x^{(k)}} \\ &= n_x(k) \sigma_x^{(k)} + \{ n_y(k) \sigma_y^{(k)} + n_z(k) \sigma_z^{(k)} \} \cos(2\Lambda_k t) + \{ n_y(k) \sigma_z^k - n_z(k) \sigma_y^{(k)} \} \sin(2\Lambda_k t) . \end{aligned} \quad (3.262)$$

Nach dem Rückquench ist dies abzuändern zu

$$\begin{aligned} \hat{t}(k) &= n_x(k) \sigma_x^{(k)} + \vec{n}_\perp(k) \cdot \vec{\sigma}^{(k)} e^{2\iota \Lambda_k^{(0)} t \sigma_x^{(k)}} \\ &= n_x(k) \sigma_x^{(k)} + \{ n_y(k) \sigma_y^{(k)} + n_z(k) \sigma_z^{(k)} \} \cos(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) \\ &\quad + \{ n_y(k) \sigma_z^k - n_z(k) \sigma_y^{(k)} \} \sin(2\Lambda_k^{(0)}(t - t')) . \end{aligned} \quad (3.263)$$

Der Vektor \vec{n} sei dabei normiert, d. h. $n_x^2 + |\vec{n}_\perp|^2 = 1$, und es gelte $n_\perp \cdot \vec{e}_x = 0$. σ_α^k , $\alpha = x, y, z$ bezeichnet eine Drehung der Pauli-Matrizen gemäß

$$\sigma_\alpha^k \propto e^{\iota \vec{\omega}(k) t} \sigma_\alpha e^{-\iota \vec{\omega}(k) t} . \quad (3.264)$$

Ein Vergleich der Ausdrücke (3.262) und (3.263) für $\hat{t}(k)$ vor bzw. nach dem Rückquench zu den entsprechenden Ausdrücken (3.260) und (3.261) für $\hat{\Gamma}(k)$ zeigt, dass in beiden Fällen für

$$\vec{\omega}(k) = \frac{1}{2} (\theta_k - k - \frac{\pi}{2}) \vec{e}_z \quad (3.265)$$

und die Wahl der Proportionalitätskonstante in (3.264) zu $-\iota$, d. h.

$$\sigma_x^{(k)} = -\iota [\sin(\theta_k - k) \sigma_x + \cos(\theta_k - k) \sigma_y], \quad (3.266a)$$

$$\sigma_y^{(k)} = -\iota [\sin(\theta_k - k) \sigma_y - \cos(\theta_k - k) \sigma_x], \quad (3.266b)$$

$$\sigma_z^{(k)} = -\iota \sigma_z \quad (3.266c)$$

sowie

$$n_x(k) = \cos(\Delta_k), \quad (3.267a)$$

$$\vec{n}_\perp = \sin(\Delta_k) \vec{e}_y \quad (3.267b)$$

vor dem Rückquench und

$$n_x(k) = \cos^2(\Delta_k) + \sin^2(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t'), \quad (3.268a)$$

$$\vec{n}_\perp = -\sin(\Delta_k) \cos(\Delta_k) \{1 - \cos(2\Lambda_k t')\} \vec{e}_y + \sin(\Delta_k) \sin(2\Lambda_k t') \vec{e}_z \quad (3.268b)$$

nach dem Rückquench eine Übereinstimmung von $\hat{t}(k)$ und $\hat{\Gamma}(k)$ gegeben ist. In [47] wurde gezeigt, dass im thermodynamischen Limes für $r, t \rightarrow \infty$ bei festem Verhältnis t/r nur ein Beitrag durch $n_x(k)$ zur gleichzeitigen Korrelationsfunktion gegeben ist und dass diese geschrieben werden kann als

$$\lim_{\substack{r, t \rightarrow \infty \\ t/r \text{ fest}}} C^{xx}(r, t) = \exp \left\{ 2 \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \min(2|v_k|t, r) \ln(|n_x|) \right\}. \quad (3.269)$$

Hieraus wurde für das einfache Quenchprotokoll die modifizierte Besetzungszahl

$$\tilde{f}_k = -\frac{1}{2} \ln(|\cos(\Delta_k)|) \quad (3.270)$$

extrahiert, die auch für das modifizierte Quenchprotokoll vor dem Rückquench verwendet wird. In analoger Weise ergibt sich nach dem Rückquench aus dem exakten Ausdruck die modifizierte Besetzungszahl

$$\tilde{f}_k^{(0)}(t') = -\frac{1}{2} \ln(|\cos^2(\Delta_k) + \sin^2(\Delta_k) \cos(2\Lambda_k t')|) = -\frac{1}{2} \ln(|1 - 2\sin^2(\Delta_k) \sin^2(\Lambda_k t')|) \quad (3.271)$$

bzw. ausgedrückt über $f_k^{(0)}(t')$

$$\tilde{f}_k^{(0)}(t') = -\frac{1}{2} \ln(|1 - 2f_k^{(0)}(t')|). \quad (3.272)$$

Wie im Falle der Besetzungszahlen der Quasiteilchen nach dem Quench gilt somit

$$\tilde{f}_k^{(0)}(t') \approx f_k^{(0)}(t') + \mathcal{O}(f_k^{(0)}(t')^2), \quad (3.273)$$

d. h. im Falle kleiner Besetzungen nach dem Rückquench gilt in erster Ordnung $\tilde{f}_k^{(0)}(t') = f_k^{(0)}(t')$.

Eine Betrachtung der modifizierten Besetzungszahl nach dem Rückquench als Funktion des Zeitpunktes t' des Rückquenchs zeigt, dass $\tilde{f}_k^{(0)}(t')$ zwischen 0 (für $\cos(\Lambda_k t') = 1$) und einem Maximalwert oszilliert, wobei die Periodendauer abhängig ist von der Energie Λ_k der Quasiteilchen vor dem Rückquench. Die Maximalwerte definieren wiederum wie schon $\sin^2(\Delta_k)$ im Falle der $f_k^{(0)}(t')$ eine Einhüllende für den Verlauf der modifizierten Besetzungszahlen.

3.8.4 Resultate

Mithilfe der Freie-Fermionen-Technik können sowohl die Korrelationsfunktionen, die lokale Magnetisierung als auch die Verschränkungsentropie zweier Subsysteme berechnet werden und es ergeben sich keine Einschränkungen in Bezug auf die erreichbaren Zeiten. Für die semiklassische Theorie hingegen existieren

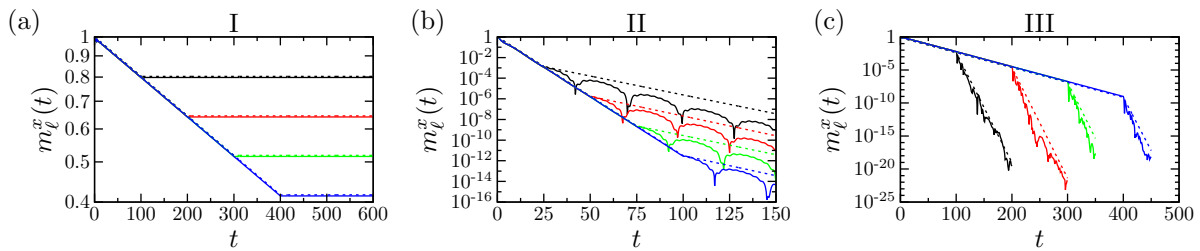


Abbildung 3.24: (a) - (c) Zeitentwicklung der lokalen Magnetisierung für das modifizierte Quenchprotokoll mit Rückquench für Quenches mit den Quenchparametern aus I-III. Betrachtet wird die Position in der Mitte einer Kette der Länge $L = 256$ mit freien Randbedingungen. Kontinuierliche Linien bezeichnen die exakten Resultate der Freie-Fermionen-Technik, gestrichelte Linien die Resultate der semiklassischen Theorie mit modifizierter Besetzungszahl. Für die Quenchprotokolle I und III sind die Zeitpunkte t' der Rückquenches gewählt zu $-t' = 100$, $-t' = 200$, $-t' = 300$, $-t' = 400$ und für das Quenchprotokoll II zu $-t' = 25$, $-t' = 50$, $-t' = 75$, $-t' = 100$. Dargestellt sind jeweils nur Zeiten, für die für alle Wellenzahlen k die Bedingung $|v_k|t' + |v_k^{(0)}|(t-t') \leq \frac{L}{2}$ erfüllt ist, d. h. für die die betrachtete Position in der Mitte der Kette höchstens von einem Quasiteilchen eines jeden Quasiteilchenpaares passiert wurde.

die bereits erläuterten Einschränkungen, die darin bestehen, dass das System nur für Zeiten betrachtet werden kann, zu denen die für die jeweilige Observable relevanten Positionen höchstens von einem Quasiteilchen eines jeden Quasiteilchenpaares passiert wurden. Die Berechnung der Verschränkungsentropie ist nach dem Rückquench aufgrund der Unklarheit in Bezug auf die Verschränkung der durch den ersten Quench und den Rückquench erzeugter Quasiteilchen nicht möglich. Es werde sich im Folgenden somit exemplarisch auf die lokale Magnetisierung und hinreichend kurze Zeiten beschränkt, um die Resultate der semiklassischen Theorie mit den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik vergleichen zu können. Betrachtet wird eine Kette mit freien Randbedingungen der Länge $L = 256$. Die lokale Magnetisierung wird für den Spin an der Position in der Mitte der Kette bestimmt, da für diesen die Zeit, bis aufgrund der endlichen Systemgröße ein Quasiteilchen eines Quasiteilchenpaares die Position ein zweites Mal passiert bzw. das andere Quasiteilchen des Quasiteilchenpaares die Position ebenfalls passiert für gegebene Kettenlänge größtmöglich ist. Untersucht werden Quenches gemäß der Quenchprotokolle I-III, die vollständig innerhalb der ferromagnetischen Phase verlaufen und für die sich in den bisherigen Betrachtungen für das einfache Quenchprotokoll eine gute Übereinstimmung der exakten Zeitentwicklung und der semiklassischen Resultate gezeigt hat.

Nach dem Rückquench in Quenchprotokoll I wird das System durch den Hamiltonoperator des Ising-Modells ohne Transversalfeld beschrieben. Da dieser mit $\hat{\sigma}_\ell^x$ kommutiert, wird sich die lokale Magnetisierung nach dem Rückquench nicht mehr ändern. In der semiklassischen Theorie folgt dies daraus, dass die Geschwindigkeit der Quasiteilchen zu jeder Wellenzahl k nach dem Rückquench null beträgt. Die Quenchprotokolle II und III sind entgegengesetzt zueinander. Somit stimmen Energie und Geschwindigkeit der Quasiteilchen nach dem Rückquench in Quenchprotokoll II mit den Werten in Quenchprotokoll III vor dem Rückquench überein und umgekehrt. Sie können somit aus den Graphen (a) und (b) von Abbildung 3.13 entnommen werden. In Quenchprotokoll II ist die Geschwindigkeit der Quasiteilchen nach dem Rückquench für den größten Anteil der Wellenzahlen k kleiner als davor, sodass der Abfall der lokalen Magnetisierung sich verlangsamen wird. Für Quenchprotokoll III sind die Verhältnisse umgekehrt, sodass hier die lokale Magnetisierung nach dem Rückquench schneller abfallen wird. Die Resultate für den zeitlichen Verlauf der lokalen Magnetisierung des Spins in der Mitte der Kette nach den beschriebenen Quenchprotokollen sind in Abbildung 3.24 für verschiedene Zeitpunkte t' des Rückquenches dargestellt. Für Quenchprotokoll I zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung der Resultate sowohl vor als auch nach dem Rückquench für alle betrachteten Zeitpunkte t' des Rückquenches. Wie vorhergesagt bleibt die lokale Magnetisierung nach dem Rückquench konstant. Ebenfalls der Vorhersage entsprechend fällt die lokale Magnetisierung im Falle der Quenchprotokolle II und III nach dem Rückquench langsamer bzw. schneller ab. Der Abfall ist nach dem Rückquench noch immer exponentiell, jedoch zeigen die exakten Resultate der Freie-Fermionen-Technik, dass er durch Oszillationen überlagert wird. Diese werden durch die einfache semiklassische Theorie nicht reproduziert. Die sich aus der semiklassischen Rechnung und der exakten Rechnung ergebenden Relaxationszeiten zeigen eine gute Übereinstimmung.

4 Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising-Modells in zwei Dimensionen

Nach den Betrachtungen zum transversalen XY-Modell in einer Dimension widmet sich der weitere Verlauf der vorliegenden Dissertation dem zweidimensionalen transversalen Ising-Modell, das auf einem Quadratgitter mit gerader Kantenlänge L und periodischen Randbedingungen untersucht wird. Die Gesamtzahl der Spins im System beträgt somit L^2 und werde mit N bezeichnet. Der Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells ist gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x - \frac{h}{2} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z. \quad (4.1)$$

Eine Wechselwirkung besteht wiederum nur zwischen nächsten Nachbarn. Wie bereits in dem einleitenden Kapitel zum transversalen Ising-Modell erläutert wurde, unterscheidet sich das Modell in zwei Dimensionen in wesentlichen Punkten von dem Modell in einer Dimension. Im Gegensatz zum eindimensionalen transversalen Ising-Modell, für das bei endlicher Temperatur die ferromagnetische Ordnung immer verschwindet (Abbildung 2.2 (a)), weist das zweidimensionale Modell wie in Abbildung 2.2 (b) dargestellt im thermodynamischen Limes auch für kleine Verhältnisse h/J und kleine Temperaturen T/J durch spontane Symmetriebrechung langreichweitige ferromagnetische Ordnung auf. Zudem ist das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen nichtintegrabel, d. h. in ihm stellt die Gesamtenergie die einzige Erhaltungsgröße unter der unitären Zeitentwicklung nach dem Quench dar. Für das zweidimensionale transversale Ising-Modell besteht somit die Möglichkeit, dass es nach einem Quench thermalisiert. Da das transversale Ising-Modell auf dem Quadratgitter nicht analytisch lösbar ist, existieren bislang nur wenige Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung in ihm. Bei diesen handelt es sich um die bereits im Rahmen des Überblicks über Thermalisierung in nichtintegrablen Systemen genannten Studien von Fratus und Srednicki in [160] sowie von Mondaini *et al.* in [171] auf Grundlage der Eigenstate Thermalization Hypothesis. Die Untersuchungen von Fratus und Srednicki in [160] haben sich dabei zwar nicht direkt mit dem Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell befasst, jedoch kommt ihnen eine große Bedeutung für die Anwendbarkeit der ETH auf das transversale Ising-Modell im Speziellen und quantenmechanische Vielteilchensysteme mit spontaner Symmetriebrechung im Allgemeinen zu, da in ihnen anhand des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells der Einfluss spontaner Symmetriebrechung auf die Anwendbarkeit der ETH untersucht wurde. Zu diesem Zweck wurde als Observable die Gesamtmagnetisierung des Systems betrachtet, welche durch den Operator $\hat{M}^x = \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x$ beschrieben wird und als Ordnungsparameter dient. Da spontane Symmetriebrechung nur im thermodynamischen Limes auftritt, musste für die mittels exakter Diagonalisierung untersuchte endliche Systemgröße von 4×5 der Hamiltonoperator um einen die Symmetrie brechenden Zusatzterm ergänzt werden, der von der Form $\varepsilon \hat{M}^x$ mit $\varepsilon = 10^{-3}$ gewählt wurde. Im Gegensatz zu einer beliebigen Observable beschrieben durch den Operator $\hat{\mathcal{O}}$, für die die ETH eine glatte Funktion $\mathcal{O}(E)$ vorhersagt, wurde für $M^x(E)$ eine Funktion erwartet, die einen Zweig für jeden erlaubten Wert des Ordnungsparameters umfasst. Untersucht wurde der Erwartungswert der Gesamtmagnetisierung in den Eigenzuständen des Hamiltonoperators, die zum Sektor mit verschwindendem Gesamtimpuls und gerader Parität gehören, für die Verhältnisse $h/J = 0, 0.25, 0.75, 1.5$ und 3.5 . Die Resultate von Fratus und Srednicki sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Für $h/J = 0$ ist die ETH nicht erfüllt. Für $h/J < (h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$ und nicht verschwindendes Transversalfeld (Abbildung 4.1 (b)-(d)) wurden in der Auftragung der Erwartungswerte der Gesamtmagnetisierung in den Energieeigenzuständen zwei Zweige beobachtet, einer mit positiver und einer mit negativer Gesamtmagnetisierung. Diese wurden mit einer Mean-Field-Vorhersage für das System im thermodynamischen Limes verglichen (grüne gestrichelte Linie in den Abbildungen). Der Vergleich ergab eine verhältnismäßig gute Übereinstimmung, wobei die Abweichungen der endlichen Systemgröße zugeschrieben wurden. Weiterhin zeigt sich in den Abbildungen die Abnahme von $(T/J)_{\text{crit}}$ mit zunehmendem Verhältnis h/J . Hierzu ist die Energie in die entsprechende Temperatur umzurechnen. Für $h/J > (h/J)_{\text{crit}}$ befindet sich das System unabhängig von der Temperatur in der paramagnetischen Phase und der Erwartungswert der Gesamtmagnetisierung verschwindet in jedem Energieeigenzustand (Abbildung 4.1 (e)). Aus den Resultaten wurde gefolgert, dass die ETH auch auf Systeme mit spontaner Symmetriebrechung angewendet werden kann. Im Falle von Observablen, die als Ordnungsparameter fungieren, ist dabei die von der ETH vorhergesagte glatte Funktion $\mathcal{O}(E)$ für beliebige Observablen durch eine Funktion zu ersetzen, die mehrere Werte annehmen kann, sodass sich mehrere Zweige ergeben.

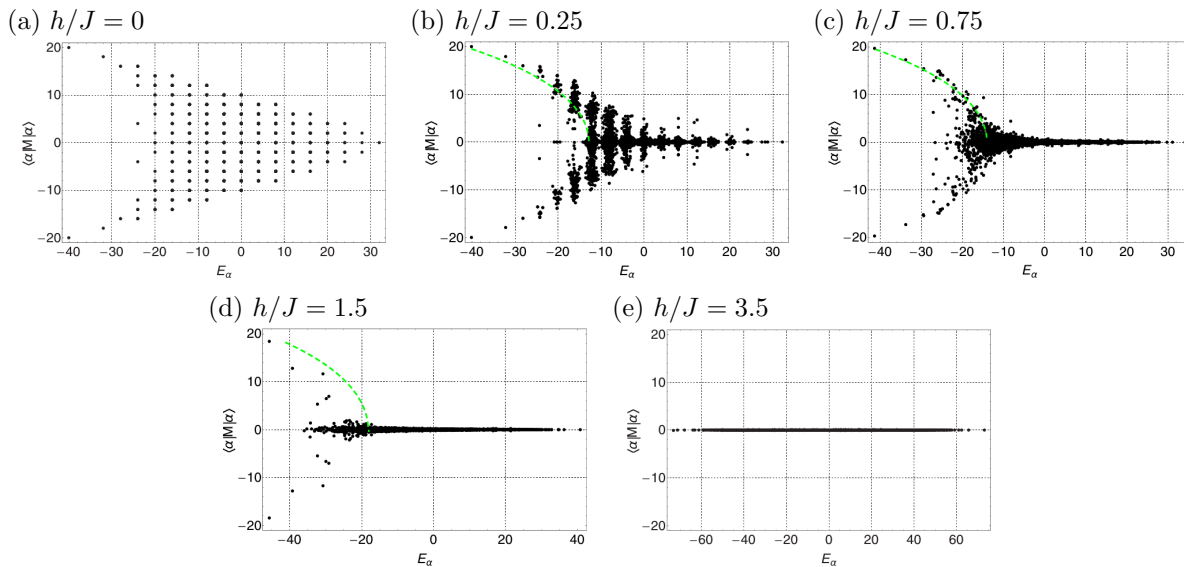


Abbildung 4.1: (a) - (e) Erwartungswert der Gesamtmagnetisierung in Energieeigenzuständen des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells mit verschwindendem Gesamtimpuls und gerader Parität für $h/J = 0, 0.25, 0.75, 1.5$ und 3.5 . Die gestrichelte grüne Linie stellt eine Mean-Field-Vorhersage für das System im thermodynamischen Limes dar. Die Abbildungen wurden aus [160] entnommen. *Reprinted with permission from Fratus and Srednicki, Physical Review E* **92**, 040103(R), 2015. Copyright 2015 by the American Physical Society.

Aufbauend auf [160] wurde in [171] durch Mondaini *et al.* das Auftreten von Eigenstate Thermalization im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell untersucht. Hierbei wurden sowohl ferromagnetische als auch antiferromagnetische Systeme betrachtet, wobei im antiferromagnetischen Fall ein zusätzliches Longitudinalfeld angelegt wurde. Zum Vergleich mit den im Rahmen der vorliegenden Dissertation gewonnenen Erkenntnissen sind nur die Untersuchungen von Mondaini *et al.* am ferromagnetischen System von Bedeutung, welches im Gegensatz zu [160] ohne symmetriebrechenden Term im Hamiltonoperator betrachtet wurde. Als Observablen wurde zum einen die in [158] eingeführte *strukturelle Entropie* (Structural Entropy)

$$S_\lambda^{\text{str}} := S_\lambda^{\text{inf}} - \ln(\xi_\lambda) \quad (4.2)$$

betrachtet, um das Auftreten von Quantenchaos untersuchen zu können. Hierbei bezeichnet

$$S_\lambda^{\text{inf}} := - \sum_\nu |c_{\nu,\lambda}|^2 \ln(|c_{\nu,\lambda}|^2) \quad (4.3)$$

die Shannon-Entropie (Informationsentropie) und

$$\xi_\lambda := \frac{1}{\sum_\nu |c_{\nu,\lambda}|^4} \quad (4.4)$$

das Inverse Participation Ratio (IPR). Das IPR stellt nach [158] ein Maß für den Grad der Delokalisierung der einzelnen Eigenvektoren dar. $\{|\Phi_\nu\rangle\}$ ist die Basis, in der die Berechnungen ausgeführt werden, d. h. $|\Psi_\lambda\rangle = \sum_\nu c_{\nu,\lambda} |\Phi_\nu\rangle$ mit $c_{\nu,\lambda} = \langle \Phi_\nu | \Psi_\lambda \rangle$. Zur Untersuchung des Auftretens von Eigenstate Thermalization wurde weiterhin der *ferromagnetische Strukturfaktor*

$$\hat{S}_F := \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x \quad (4.5)$$

betrachtet, dessen Erwartungswert in allen Eigenzuständen des Hamiltonoperators des Systems berechnet wurde. Das hierzu verwendete Verfahren bestimmt die Observablen für Cluster unterschiedlicher

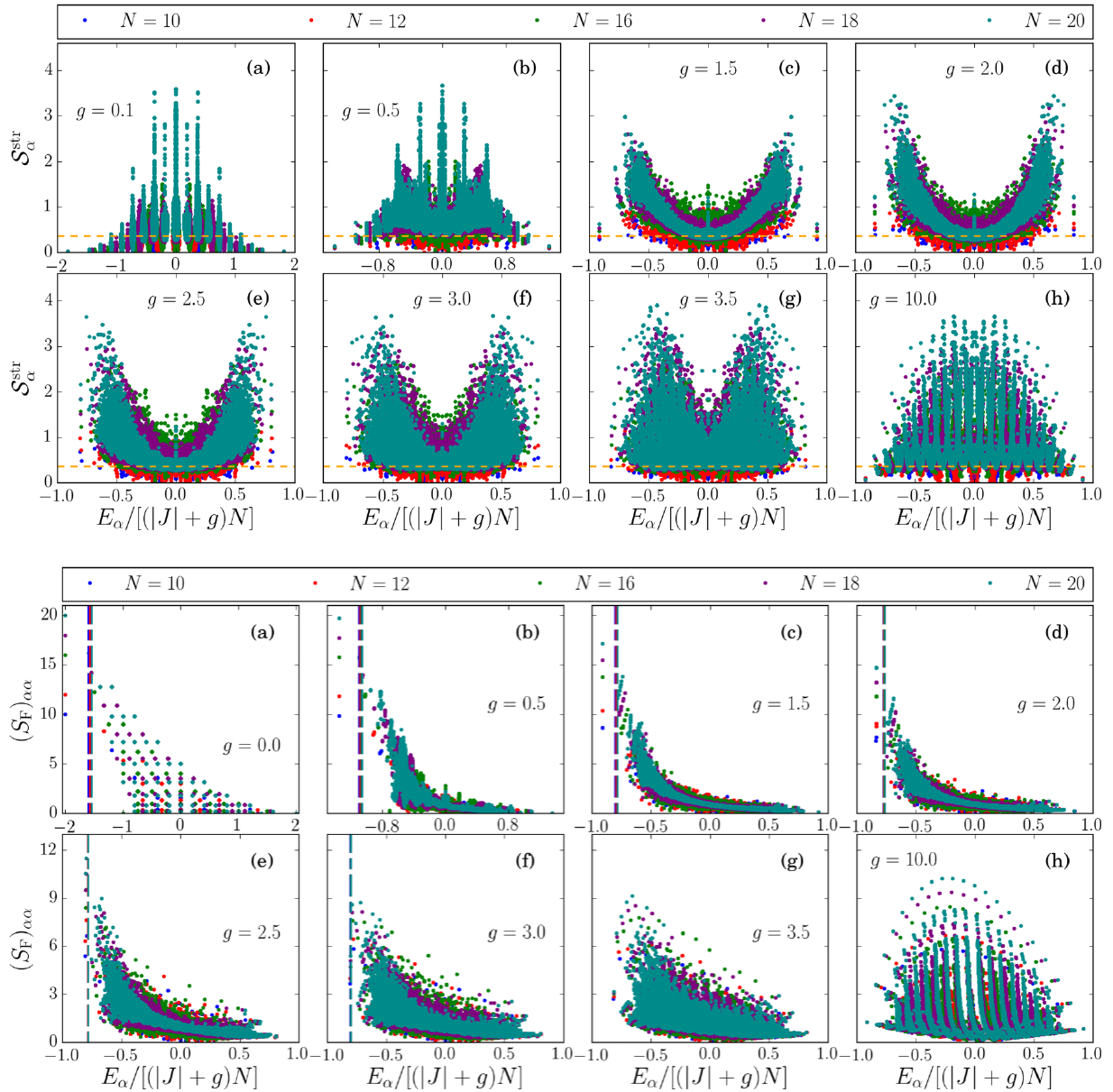


Abbildung 4.2: Obere Abbildung: Strukturelle Entropie im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell für verschiedene Systemgrößen und verschiedene Werte des Transversalfeldes. Werden die Intervalle, auf denen die möglichen Werte von S_α^{str} für einen gegebenen Wert von E_λ liegen, mit zunehmender Systemgröße für alle E_λ kleiner, so ist dies ein Indikator für das Auftreten von Quantenchaos. Untere Abbildung: Ferromagnetischer Strukturfaktor des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells für verschiedene Systemgrößen und verschiedene Werte des Transversalfeldes. Werden die Intervalle, auf denen die möglichen Werte von \hat{S}_F für einen gegebenen Wert von E_λ liegen, mit zunehmender Systemgröße für alle E_λ kleiner, so zeigt dies Eigenstate Thermalization an. Die Abbildungen wurden aus [171] entnommen. Reprinted with permission from Mondaini et al., *Physical Review E* **93**, 032104, 2016. Copyright 2016 by the American Physical Society.

Geometrie von $N = 10, 12, 14, 16, 18$ oder 20 Spins innerhalb eines größeren Gesamtsystems mithilfe exakter Diagonalisierung als Funktion von E_λ in Einheiten von $(J + h)N$ für $h/J = 0.1, 0.5, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5$ und 10 . Für die verschiedenen Verhältnisse h/J wurden die möglichen Werte der Observablen für einen gegebenen Wert von E_λ für die verschiedenen Größen der Cluster miteinander verglichen. Werden die Intervalle, auf denen die möglichen Werte der Observablen für einen gegebenen Wert von E_λ liegen, mit zunehmender Systemgröße für alle E_λ kleiner, so ist dies im Falle der strukturellen Entropie ein

Indikator für das Auftreten von Quantenchaos. Im Falle des ferromagnetischen Strukturfaktors zeigt die Verkleinerung der Intervalle Eigenstate Thermalization an. Mondaini *et al.* haben in [171] das Auftreten von Quantenchaos und Eigenstate Thermalization im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell mit ferromagnetischer Wechselwirkung für nicht verschwindende und nicht zu große Transversalfelder beobachtet. Die entsprechenden Resultate sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Hierbei ist zu beachten, dass für $h/J < (h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$ niederenergetische Energieeigenzustände zur geordneten Phase mit langreichweitiger ferromagnetischer Ordnung gehören. Wie die Berechnung der der kritischen Temperatur für ein gegebenes Verhältnis von h/J zugehörigen Energie durch Mondaini *et al.* zeigt, gehört nur ein kleiner Teil der Energieeigenzustände des Systems zur ferromagnetischen Phase. Die Abnahme der Anzahl der möglichen Werte des ferromagnetischen Strukturfaktors mit der Systemgröße wird hingegen nur im energetischen Bereich oberhalb des Überganges von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase beobachtet. Aus diesem Grund erlauben die Resultate von [171] keine Aussage zum Auftreten von Thermalisierung in der ferromagnetischen Phase.

Nach Besprechung der Resultate der ETH für das zweidimensionale transversale Ising-Modell werde nun noch auf die Anwendung des Theorems von Doyon auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell eingegangen. Hierzu gilt es zunächst zu überprüfen, ob die Voraussetzungen des Theorems erfüllt sind. Wie im einführenden Kapitel zum transversalen Ising-Modell erläutert wurde, folgt aus den Resultaten von Kliesch *et al.* in [213], dass thermische Zustände für hinreichend große Temperaturen exponentiell clustern. Diese Temperatur ist im Falle des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells durch die Temperatur des Phasenüberganges von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase gegeben, welche wie in Abbildung 2.2 (b) dargestellt wiederum vom Verhältnis h/J der Parameter des Hamiltonoperators abhängt. Der Grundzustand ($T = 0$) des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells in der paramagnetischen Phase ist nach Hastings [207] sowie Nachtergaele und Sims [212] ebenfalls exponentiell clusternd, da das System für $h/J > (h/J)_{\text{crit}}$ keine Energielücke aufweist. Das Theorem von Doyon kann somit auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell in der paramagnetischen Phase angewendet werden. Aufgrund der Nichtintegrität des Systems auf dem Quadratgitter sagt das Theorem für das zweidimensionale transversale Ising-Modell im thermodynamischen Limes Thermalisierung voraus. In der ferromagnetischen Phase hingegen ist der funktionale Verlauf der Korrelationen zwischen zwei Spins in Abhängigkeit von ihrem Abstand nicht bekannt. Bekannt ist jedoch, dass die Korrelationen zwischen weit voneinander entfernten Spins nicht zu null hin abfallen, sondern einen durch das Quadrat des Betrages der Magnetisierung gegeben Wert erreichen. Das Theorem von Doyon erlaubt infolgedessen keine Aussage für das transversale Ising-Modell in der ferromagnetischen Phase.

Insgesamt kann somit festgehalten werden, dass sowohl die Eigenstate Thermalization Hypothesis als auch das Theorem von Doyon für das zweidimensionale transversale Ising-Modell in der paramagnetischen Phase Thermalisierung voraussagen, jedoch keine Aussagen zum Auftreten von Thermalisierung in der ferromagnetischen Phase liefern. Im Falle der ETH wird Thermalisierung für nicht verschwindende und nicht zu starke Transversalfelder sowie hinreichend hohe Temperaturen vorhergesagt. Hierbei gilt es allerdings zu beachten, dass die ETH lediglich eine notwendige, jedoch keine hinreichende Bedingung für das Auftreten von Thermalisierung darstellt, sodass kein Widerspruch zu dem durch das Theorem von Doyon vorhergesagten Auftreten von Thermalisierung innerhalb der gesamten paramagnetischen Phase besteht. Ebenfalls ist festzuhalten, dass nur wenige Resultate für die Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach einem Quench vorliegen, sich diese jedoch nicht mit dem Auftreten von Thermalisierung beschäftigen [42, 57, 223]. Die Bestimmung der Zeitentwicklung des Systems nach verschiedenen Quenchprotokollen sowie die Untersuchung seines stationären Zustandes auf das Auftreten von Thermalisierung wird infolgedessen das zentrale Thema des weiteren Verlaufs der vorliegenden Dissertation darstellen. In der paramagnetischen Phase gilt es hierbei die Vorhersagen der ETH und des Theorems von Doyon zu überprüfen, wohingegen in der ferromagnetischen Phase erste Resultate gewonnen werden müssen. Die Untersuchungen beginnen mit einer Erläuterung der Gründe, weshalb der Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells im Gegensatz zu demjenigen des Modells in einer Dimension nicht durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden kann. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit neuer Verfahren zur Untersuchung sowohl thermischer Erwartungswerte als auch der Zeitentwicklung des Systems nach einem Quench. Im weiteren Verlauf wird zunächst das System im thermischen Gleichgewicht betrachtet und ein auf Rieger und Kawashima in [209] zurückgehendes Verfahren auf Basis eines Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit zur Bestimmung der Erwartungswerte des Betrages der Magnetisierung sowie der Korrelationsfunktionen gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble für das System bei einer endlichen

Temperatur $T > 0$ beschrieben. Im Anschluss daran wird die Zeitentwicklung des Systems nach einem Quench betrachtet. Nach einem kurzen Überblick über den Stand der Forschung zur Zeitentwicklung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell sowie einer Erläuterung störungstheoretischer Ansätze zur Beschreibung der unitären Zeitentwicklung wird in den folgenden Kapiteln ein auf Variations-Monte-Carlo basierendes Verfahren in kontinuierlicher Realzeit (real-time Variational Monte Carlo, rt-VMC) vorgestellt [98, 224], welcher es erlauben wird, die Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells für lange Zeiten mit hoher Genauigkeit zu beschreiben. Hierbei wird zwischen Wechselwirkungsquenches in der paramagnetischen Phase und Feldquenches in der ferromagnetischen Phase unterschieden werden. Die Resultate und die Beschreibung der Verfahren zu ihrer Bestimmung wurden in weiten Teilen bereits in [61] veröffentlicht. Zur Beantwortung der Frage, ob das zweidimensionale transversale Ising-Modell thermalisiert, werden die thermischen Erwartungswerte der Observablen des Systems im Gleichgewicht bei einer dem System nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur sowie die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren mit den zeitlichen Mittelwerten nach den Quenches verglichen. Falls das System thermalisiert, ist hier eine Übereinstimmung zu erwarten. Für die Erwartungswerte der Observablen ist das Zeitmittel gegeben durch

$$\overline{\langle \hat{O} \rangle}_t = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \text{Sp}[\hat{O} \hat{\rho}(t)] \quad (4.6)$$

mit dem durch die Wellenfunktion $|\Psi(t)\rangle$ des Systems zum Zeitpunkt t bestimmten zeitabhängigen Dichteoperator $\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$. Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von \hat{O} ist

$$p_t(\mathcal{O}_j) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \text{Tr}[\delta(\mathcal{O}_j - \hat{O}) \hat{\rho}(t)] , \quad (4.7)$$

wobei \mathcal{O}_j die möglicherweise entarteten Eigenwerte von \hat{O} bezeichnet. Die Zeitmittel werden mit Ensemblemittelwerten im kanonischen Gibbs-Ensembles bei der dem System nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur verglichen. Diese lauten

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}} = \frac{1}{Z_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}}} \text{Sp}[\hat{O} e^{-\hat{H}/T_{\text{eff}}}] \quad \text{mit} \quad Z_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}} = [e^{-\hat{H}/T_{\text{eff}}}] \quad (4.8)$$

für die Erwartungswerte der Observablen und

$$p_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}}(\mathcal{O}_j) = \frac{1}{Z_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}}} \text{Tr}[\delta(\mathcal{O}_j - \hat{O}) e^{-\hat{H}/T_{\text{eff}}}] \quad (4.9)$$

für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Die Berechnung der Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeitsverteilungen wird im Folgenden beschrieben. In einer Erweiterung der Untersuchungen in [61] werden diese auch in Subsystemen bestimmt. Den Abschluss der Untersuchungen der Nichtgleichgewichtsdynamik wird schließlich die Untersuchung der Ausbreitung einer zu Beginn lokalen Störung im System mithilfe eines zeitabhängigen Mean-Field-Verfahrens auf Grundlage der BBGKY-Hierarchie bilden, um sowohl die Geschwindigkeit von Information als auch die ihrer Ausbreitung zugrundeliegende Metrik zu ermitteln. Die Untersuchungen hierzu wurden in Zusammenarbeit mit Jonas Hafner durchgeführt und die gewonnenen Erkenntnisse im Rahmen seiner Masterarbeit [225] sowie in [62] veröffentlicht. Zunächst werde sich jedoch der Frage nach dem Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell zugewandt.

4.1 Observablen

Als Observablen im Rahmen der Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell werden der renormierte Betrag der Magnetisierung $\hat{\mu}_{\text{BR}}^x$ nach (2.10)

$$\hat{\mu}_{\text{BR}}^x = \frac{\hat{\mu}_{\text{B}}^x - \mu_{\text{B},\text{min}}^x}{1 - \mu_{\text{B},\text{min}}^x} . \quad (4.10)$$

betrachtet sowie die Korrelationsfunktion zweier Spins in beliebigen Abständen zueinander, die für das zweidimensionale System gegeben ist durch

$$\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} = \frac{1}{N_{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^x . \quad (4.11)$$

Die $\mathbf{r} = (r_x, r_y)$ bezeichnen hierbei alle unabhängigen Richtungen innerhalb des Gitters. Zwei Richtungen werden als unabhängig bezeichnet, wenn sie nicht durch Umkehr des Vorzeichens einer oder beider Komponenten der sie beschreibenden Vektoren oder Vertauschung der x - und der y -Komponente ineinander überführt werden können. Die Definition einer abhängigen Richtung ergibt sich entsprechend. $N_{\mathbf{r}}$ bezeichnet die Anzahl aller Spinpaare, die zur unabhängigen Richtung \mathbf{r} gehören. Zu jedem \mathbf{r} existieren mehrere abhängige Richtungen. Der Abstand der Spins wird mit r bezeichnet und in der Manhattan-Metrik gemessen, d. h. $r = |r_x| + |r_y|$. Bei der Bestimmung der Observablen erfolgt im Falle der Magnetisierung eine Mittelung über alle Spins des Systems bzw. im Falle der Korrelationsfunktionen zweier Spins im Abstand \mathbf{r} eine Mittelung über alle Spinpaare zu allen abhängigen Richtungen zu \mathbf{r} . Die Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn wird im Folgenden eine besondere Rolle spielen. Der zugehörige Operator wird mit \hat{C}_{nn}^{xx} bezeichnet und ist von der Gestalt

$$\hat{C}_{\text{nn}}^{xx} = \frac{1}{2N} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x . \quad (4.12)$$

\hat{C}_{nn}^{xx} entspricht somit dem Diagonalanteil des Hamiltonoperators pro Spin in Einheiten von $-J$. Zur Untersuchung des Systems auf das Auftreten von Thermalisierung nach den Quenches werden nicht nur die Erwartungswerte der Observablen untersucht, sondern auch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren. Dies erfolgt wiederum in der \mathbf{x} -Basis, da die Operatoren in dieser diagonal sind. Im Falle des renormierten Betrages der Magnetisierung werden die Erwartungswerte des Operators $\hat{\mu}^x$ der Magnetisierung nach (2.4) betrachtet. Sie werden mit μ_m^x bezeichnet und liegen äquidistant im Intervall $[-1, 1]$. m gibt die Anzahl der Spin down eines Basiszustandes der \mathbf{x} -Basis an. Es ist somit

$$\mu_m^x = \frac{N - 2m}{N} \quad \text{mit} \quad m = 0, 1, \dots, N - 1, N . \quad (4.13)$$

Die Anzahl der verschiedenen Eigenwerte von $\hat{\mu}^x$ beträgt $N + 1$ für ein System aus N Spins. Weiterhin wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} betrachtet, der die Korrelationsfunktion nächster Nachbarn misst. Seine Eigenwerte werden im Folgenden mit ε_n^{xx} bezeichnet. n ist hierbei die Anzahl der Kinks in einem Basiszustand der \mathbf{x} -Basis. Die ε_n^{xx} liegen ebenfalls im Intervall $[-1, 1]$. Es ist

$$\varepsilon_n^{xx} = \frac{N - n}{N} \quad \text{mit} \quad n = 0, 4, 6, \dots, 2N - 6, 2N - 4, 2N . \quad (4.14)$$

Die Kinkzahlen 2 und $N - 2$ sind im zweidimensionalen System mit periodischen Randbedingungen nicht möglich. Die Anzahl der verschiedenen Eigenwerte von \hat{C}_{nn}^{xx} beträgt für ein System aus N Spins $N - 1$. Sie entsprechen den Eigenwerten des Diagonalanteils des Hamiltonoperators pro Spin in Einheiten von $-J$.

4.2 Quenchprotokolle

Im Rahmen der Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell werden zwei spezielle Quenchprotokolle betrachtet werden. Bei diesen handelt es sich um *Wechselwirkungsquenchs* und *Feldquenchs*. Vor den Quenchs wird das System im Grundzustand des initialen Hamiltonoperators präpariert.

Wechselwirkungsquenchs

Wechselwirkungsquenchs betreffen lediglich die Kopplungskonstante J des Systems. Die im Rahmen der Untersuchungen zum zweidimensionalen transversalen Ising-Modell betrachteten Wechselwirkungsquenchs werden durch das Quenchprotokoll

$$(0, h) \rightarrow (J, h) \quad (4.15)$$

beschrieben, d. h. eine Wechselwirkung der Spins des Systems untereinander wird erst durch den Quench eingeschaltet. Das externe transversale Feld wird durch die Wechselwirkungsquenchs nicht geändert. Es hat einen festen Wert von $h > 0$. Der Ausgangspunkt der Wechselwirkungsquenchs liegt somit in der paramagnetischen Phase. Durch die fehlende Wechselwirkung untereinander vor dem Quench und das anliegende Transversalfeld sind im Anfangszustand alle Spins entlang des Transversalfeldes in z -Richtung ausgerichtet:

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z . \quad (4.16)$$

Ausgedrückt in der \mathbf{x} -Basis entspricht dieser Zustand der normierten symmetrischen Überlagerung aller Basiszustände:

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle . \quad (4.17)$$

Die Energie dieses Zustandes beträgt $-h/2$ pro Spin. Aus der Struktur des Anfangszustandes ist unmittelbar ersichtlich, dass durch das beschriebene Quenchprotokoll der Wechselwirkungsquenchs die Gesamtenergie des Systems nicht geändert wird, d. h. $E = E_0^{(0)}$ und somit $\Delta E = 0$ mit ΔE der Energiedifferenz der Gesamtenergien des Systems nach und vor dem Quench gemäß (1.6). Die Exzessenergie des Systems nach dem Quench gemäß (1.7) ergibt sich somit ausschließlich durch die Absenkung der Energie des Grundzustandes des Systems durch den Quench:

$$E_{\text{exz}} = E_0^{(0)} - E_0 . \quad (4.18)$$

Feldquenchs

Feldquenchs betreffen ausschließlich die Stärke des externen transversalen Feldes h . Die hier betrachteten Feldquenchs werden durch das Quenchprotokoll

$$(J, 0) \rightarrow (J, h) . \quad (4.19)$$

beschrieben. Durch sie wird ein externes transversales Feld $h > 0$ eingeschaltet. Vor dem Quench liegt kein externes transversales Feld an. Es besteht lediglich eine nichtverschwindende Kopplung $J > 0$ zwischen den Spins, die durch den Feldquench nicht geändert wird. Die Spins sind im Anfangszustand somit parallel zueinander angeordnet in Bezug auf die x -Richtung. Eine Ordnungsbeziehung besteht jedoch nur relativ zu den anderen Spins. Da in Systemen endlicher Größe keine spontane Symmetriebrechung auftritt, existiert infolgedessen keine Vorzugsrichtung, da energetisch betrachtet keine Unterschiede zwischen den beiden vollständig magnetisierten Zuständen $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x$ und $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle_x$ sowie allen normierten Überlagerungen dieser Zustände bestehen. Die Energie der Zustände pro Spin beträgt $-J$. Aufgrund der nicht gebrochenen \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie wird die symmetrische Überlagerung $|\Psi_0^+\rangle$ gemäß (2.7a) als Anfangszustand für die Feldquenchs gewählt, d. h.

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle_x \right) . \quad (4.20)$$

Demgegenüber würde sich im thermodynamischen Limes, der im Rahmen der Simulationen nicht zugänglich ist, als Anfangszustand für die Feldquenchs $|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\rangle_x$ ergeben. Die Zeitentwicklung des Erwartungswertes eines Operators \hat{O} ausgehend vom Anfangszustand für Systeme endlicher Größe lautet

$$\langle\hat{O}\rangle_t = \frac{1}{2} \left\{ \begin{aligned} &{}_x\langle\uparrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow|e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}|\uparrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow\rangle_x + {}_x\langle\downarrow\downarrow\dots\downarrow\downarrow|e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}|\downarrow\downarrow\dots\downarrow\downarrow\rangle_x \\ &+ {}_x\langle\uparrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow|e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}|\downarrow\downarrow\dots\downarrow\downarrow\rangle_x + {}_x\langle\downarrow\downarrow\dots\downarrow\downarrow|e^{i\hat{H}t}\hat{O}e^{-i\hat{H}t}|\uparrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow\rangle_x \end{aligned} \right\}. \quad (4.21)$$

Es werden nun konkret der Operator $\hat{\mu}_{\text{BR}}^x$ für den renormierten Betrag der Magnetisierung sowie die Operatoren $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ für die Korrelationsfunktionen zweier Spins in x -Richtung untersucht. Da $\hat{\mu}_{\text{BR}}^x$ Beträge betrachtet und $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ relative Orientierungen von Spins, stimmen die ersten beiden Summanden von (4.21) überein. Die Werte der beiden verbleibenden Summanden stimmen ebenfalls überein. Anhand der Reihenentwicklung der Zeitentwicklungsoperatoren wird ersichtlich, dass die Matrixelemente im thermodynamischen Limes verschwinden. Dies ergibt sich daraus, dass $\hat{\mu}_{\text{BR}}^x$ und die $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ diagonal in der \mathbf{x} -Basis sind und somit ausschließlich durch die Wirkung der Transversalkomponente des Hamiltonoperators Spins umgeklappt werden. Damit der Überlapp der Zustände nicht verschwindet, müssen alle Spins des Systems umgeklappt werden. Im thermodynamischen Limes bedeutet dies, dass in der Reihenentwicklung sich erst in n -ter Ordnung mit $n \rightarrow \infty$ ein Beitrag ergibt, welcher jedoch aufgrund der Vorfaktoren verschwindet. Somit zeigt sich, dass ausgehend von dem Anfangszustand für endliche Systemgrößen im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ die Resultate in diejenigen für das System im thermodynamischen Limes übergehen, sodass auch in der ferromagnetischen Phase ein Finite-Size-Scaling möglich ist. Dies ist insbesondere für die Magnetisierung von Bedeutung, da auf diese Weise der renormierte Betrag der Magnetisierung bereits für endliche Systemgrößen Rückschlüsse auf die Existenz der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase im thermodynamischen Limes erlaubt.

Wie im Falle der Wechselwirkungsquenchs wird auch durch die Feldquenchs die Gesamtenergie des Systems nicht geändert. Die Exzessenergie ist durch die Absenkung der Grundzustandsenergie des Systems durch den Quench bestimmt und ist gegeben durch (4.18).

Effektive Temperatur

Die effektive Temperatur des Systems nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs ist dadurch bestimmt, dass die thermische Exzessenergie und die durch den Quench induzierte Exzessenergie übereinstimmen müssen. Die effektive Temperatur ergibt sich also aus der Bedingung

$$\langle\Psi_0^{(0)}|\hat{H}|\Psi_0^{(0)}\rangle = \langle\hat{H}\rangle_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}} \quad (4.22)$$

gemäß (3.195). Die Kenntnis des Erwartungswertes der Energie im Grundzustand des Hamiltonoperators nach dem Quench ist nicht erforderlich, da sie beim Gleichsetzen der thermischen und der durch den Quench induzierten Exzessenergie mit gleichem Vorzeichen auf beiden Seiten der Gleichung auftritt. Für die betrachteten Quenchprotokolle ist $\langle\Psi_0^{(0)}|\hat{H}|\Psi_0^{(0)}\rangle$ unmittelbar bekannt. Wie bereits erläutert wurde, stimmt der Erwartungswert der Energie nach dem Quench mit der Grundzustandsenergie vor dem Quench überein, beträgt also für die Wechselwirkungsquenchs $-h/2$ pro Spin im System und für die Feldquenchs $-J$ pro Spin im System. Die Berechnung des thermischen Erwartungswertes hingegen gestaltet sich schwieriger, da der Hamiltonoperator nicht durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden kann wie im Falle des eindimensionalen Systems. Im Folgenden wird zunächst erläutert werden, weshalb eine solche Transformation im Falle des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nicht möglich ist. Im Anschluss daran werden Verfahren sowohl zur Berechnung der thermischen Erwartungswerte als auch der Zeitentwicklung nach dem Quench erläutert werden.

4.3 Nichtdiagonalisierbarkeit des Hamiltonoperators

Sowohl thermische Erwartungswerte als auch die Zeitentwicklung der Observablen nach den Quenches konnten für das eindimensionale transversale Ising- und das eindimensionale transversale XY-Modell durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen, die den Hamiltonoperator diagonalisiert, auf einfache Weise exakt bestimmt werden auch für Systemgrößen weit jenseits des mittels exakter Diagonalisierung zugänglichen Bereiches. Wie im Folgenden erläutert werden wird, existiert für das zweidimensionale transversale Ising-Modell keine analoge Transformation.

Den Ausgangspunkt der Betrachtungen bildet der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^L \hat{\sigma}_{i,j}^x \left\{ \hat{\sigma}_{i+1,j}^x + \hat{\sigma}_{i,j+1}^x \right\} - \frac{h}{2} \sum_{i,j=1}^L \hat{\sigma}_{i,j}^z \quad (4.23)$$

mit periodischen Randbedingungen. Die Positionen innerhalb des Gitters werden hierbei nun konkret durch ihre x - und y -Koordinate bezeichnet statt durch den Vektor \mathbf{R} wie in (4.1). Wie im Falle des Systems in einer Dimension besteht der erste Schritt der Transformation in der Einführung der Operatoren

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger := \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{i,j}^x + i \hat{\sigma}_{i,j}^y), \quad (4.24a)$$

$$\hat{a}_{i,j} := \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{i,j}^x - i \hat{\sigma}_{i,j}^y), \quad (4.24b)$$

die wiederum Hard-Core-Bosonen beschreiben und es erlauben, die Pauli-Spinoperatoren zu schreiben als

$$\hat{\sigma}_{i,j}^x = \hat{a}_{i,j}^\dagger + \hat{a}_{i,j}, \quad (4.25a)$$

$$\hat{\sigma}_{i,j}^y = -i (\hat{a}_{i,j}^\dagger - \hat{a}_{i,j}), \quad (4.25b)$$

$$\hat{\sigma}_{i,j}^z = 2\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j} - 1. \quad (4.25c)$$

Ausgedrückt über die Hard-Core-Boseoperatoren lautet der Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^L (\hat{a}_{i,j}^\dagger + \hat{a}_{i,j}) \left\{ (\hat{a}_{i+1,j}^\dagger + \hat{a}_{i+1,j}) + (\hat{a}_{i,j+1}^\dagger + \hat{a}_{i,j+1}) \right\} - h \sum_{i,j=1}^L \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j} + \frac{h}{2} N \quad (4.26a)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^L \left\{ \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i+1,j}^\dagger + \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i+1,j} + \hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i+1,j}^\dagger + \hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i+1,j} \right. \\ &\quad \left. + \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j+1}^\dagger + \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j+1} + \hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i,j+1}^\dagger + \hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i,j+1} \right\} - h \sum_{i,j=1}^L \hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j} + \frac{h}{2} N. \end{aligned} \quad (4.26b)$$

Im folgenden Schritt wird der Hamiltonoperator mithilfe der Jordan-Wigner-Transformation über die Fermioperatoren $\hat{c}_{i,j}^\dagger$ und $\hat{c}_{i,j}$ ausgedrückt. Wie bereits während der Betrachtungen für das eindimensionale System beschrieben, werden durch die Jordan-Wigner-Transformation an entsprechenden Stellen die Vorzeichen der Operatoren geändert, um die Hard-Core-Boseoperatoren mit ihrem gemischten Kommutatorverhalten in Fermioperatoren mit Antikommutatorverhalten zu überführen. Während die Jordan-Wigner-Transformation in einer Dimension eindeutig definiert ist nach (3.8) durch das Abzählen der Positionen der Kette bis hin zu der betrachteten Position im Argument der Exponentialfunktion, die das geänderte Vorzeichen bestimmt, ist diese Eindeutigkeit im Falle der zweidimensionalen Jordan-Wigner-Transformation nicht gegeben. Es existieren infolgedessen verschiedene Ansätze für die Jordan-Wigner-Transformation in zwei Dimensionen. Diese gehen zurück auf Fradkin [226], Wang [227–230] und Azzouz [231–234]. Ein Überblick über die Ansätze wurde von Derzhko in [235–238] gegeben. Im Folgenden soll der Ansatz von Azzouz kurz wiedergegeben werden. An diesem wird auch das sich bei der Transformation ergebende Problem erläutert werden. Für eine Beschreibung der Ansätze nach Fradkin und Wang sei auf die entsprechende Literatur verwiesen.

Die Jordan-Wigner-Transformation in zwei Dimensionen nach Azzouz ist gegeben durch

$$\hat{c}_{i,j}^\dagger := \hat{a}_{i,j}^\dagger \exp \left\{ -i\pi \left(\sum_{m=1}^{i-1} \sum_{n=1}^L \hat{a}_{m,n}^\dagger \hat{a}_{m,n} + \sum_{n=1}^{j-1} \hat{a}_{i,n}^\dagger \hat{a}_{i,n} \right) \right\}, \quad (4.27a)$$

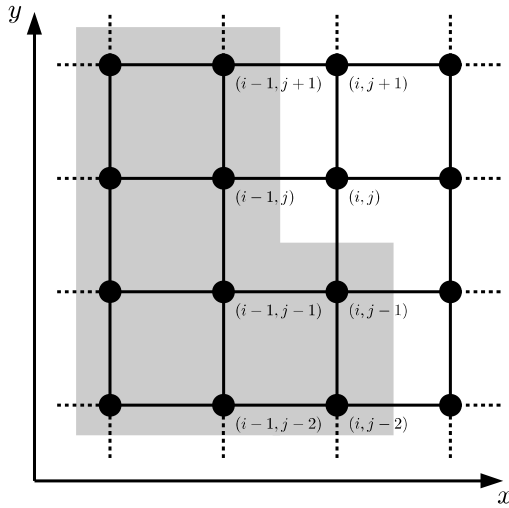


Abbildung 4.3: Bei der zweidimensionalen Jordan-Wigner-Transformation nach Azzouz zu berücksichtigende Positionen des Systems bei Anwendung auf die Hard-Core-Boseoperatoren $\hat{a}_{i,j}^\dagger$ bzw. $\hat{a}_{i,j}$. In der Summe im Argument der Exponentialfunktion in (4.28a) bzw. (4.28b) treten alle Positionen des Systems auf, deren x -Koordinate kleiner ist als die x -Koordinate der betrachteten Position, sowie alle Positionen, deren y -Koordinate bei gleicher x -Koordinate kleiner ist. Diese sind in der Abbildung hellgrau hinterlegt. Die Abbildung wurde [235] nachempfunden.

$$\hat{c}_{i,j} := \exp \left\{ i\pi \left(\sum_{m=1}^{i-1} \sum_{n=1}^L \hat{a}_{m,n}^\dagger \hat{a}_{m,n} + \sum_{n=1}^{j-1} \hat{a}_{i,n}^\dagger \hat{a}_{i,n} \right) \right\} \hat{a}_{i,j} . \quad (4.27b)$$

Die inverse Transformation zur zweidimensionalen Jordan-Wigner-Transformation nach Azzouz lautet dementsprechend

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger = \hat{c}_{i,j}^\dagger \exp \left\{ i\pi \left(\sum_{m=1}^{i-1} \sum_{n=1}^L \hat{c}_{m,n}^\dagger \hat{c}_{m,n} + \sum_{n=1}^{j-1} \hat{c}_{i,n}^\dagger \hat{c}_{i,n} \right) \right\} , \quad (4.28a)$$

$$\hat{a}_{i,j} = \exp \left\{ -i\pi \left(\sum_{m=1}^{i-1} \sum_{n=1}^L \hat{c}_{m,n}^\dagger \hat{c}_{m,n} + \sum_{n=1}^{j-1} \hat{c}_{i,n}^\dagger \hat{c}_{i,n} \right) \right\} \hat{c}_{i,j} . \quad (4.28b)$$

In Abbildung 4.3 ist dargestellt, welche Positionen des Systems zur Transformation der Operatoren $\hat{a}_{i,j}^\dagger$ bzw. $\hat{a}_{i,j}$ berücksichtigt werden müssen. Die betreffenden Positionen sind in der Abbildung hellgrau hinterlegt. Die beschriebene Transformation stellt somit wie die Jordan-Wigner-Transformation in einer Dimension eine nichtlokale Transformation dar. Da es sich bei den $\hat{c}_{m,n}^\dagger \hat{c}_{m,n}$ um fermionische Teilchenzahloperatoren handelt, lauten ihre Eigenwerte $+1$ und -1 . Im Argument der Exponentialfunktion ist das Minuszeichen somit unerheblich. Zudem kommutiert die Exponentialfunktion mit $\hat{a}_{i,j}^\dagger$ bzw. $\hat{a}_{i,j}$. In der Darstellung (4.26b) des Hamiltonoperators durch die Hard-Core-Boseoperatoren zeigt sich, dass jeweils Produkte zweier Operatoren auftreten, die auf nächstbenachbarte Positionen wirken im Falle des die Kopplung der Spins untereinander beschreibenden Anteils bzw. auf die gleiche Position im Falle des die Wechselwirkung mit dem externen transversalen Feld beschreibenden Anteils. In Abbildung 4.4 sind für die Summanden des Wechselwirkungsanteils die Positionen hervorgehoben, die bei der Transformation berücksichtigt werden müssen. Ein dunkelgrauer Hintergrund gibt an, dass die Positionen in den Transformationsvorschriften beider Operatoren des Produkts auftreten und sich ihre Beiträge dadurch gegenseitig aufheben. Hellgrau hinterlegte Positionen tauchen nur in der Transformationsvorschrift eines der beteiligten Operatoren auf. Ihr Beitrag verschwindet infolgedessen nicht. Es ergibt sich für Positionen, die nächste Nachbarn in x -Richtung sind (dargestellt in Abbildung 4.4 (a))

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i+1,j}^\dagger = \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i+1,j}^\dagger \exp \{ i\pi \hat{C}_{i,j}^x \} , \quad (4.29a)$$

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i+1,j} = \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i+1,j} \exp \{ i\pi \hat{C}_{i,j}^x \} , \quad (4.29b)$$

$$\hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i+1,j}^\dagger = -\hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i+1,j}^\dagger \exp \{ i\pi \hat{C}_{i,j}^x \} , \quad (4.29c)$$

$$\hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i+1,j} = -\hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i+1,j} \exp \{ i\pi \hat{C}_{i,j}^x \} \quad (4.29d)$$

mit

$$\hat{C}_{i,j}^x := \sum_{n=j+1}^L \hat{c}_{i,n}^\dagger \hat{c}_{i,n} + \sum_{n=1}^{j-1} \hat{c}_{i+1,n}^\dagger \hat{c}_{i+1,n} . \quad (4.30)$$

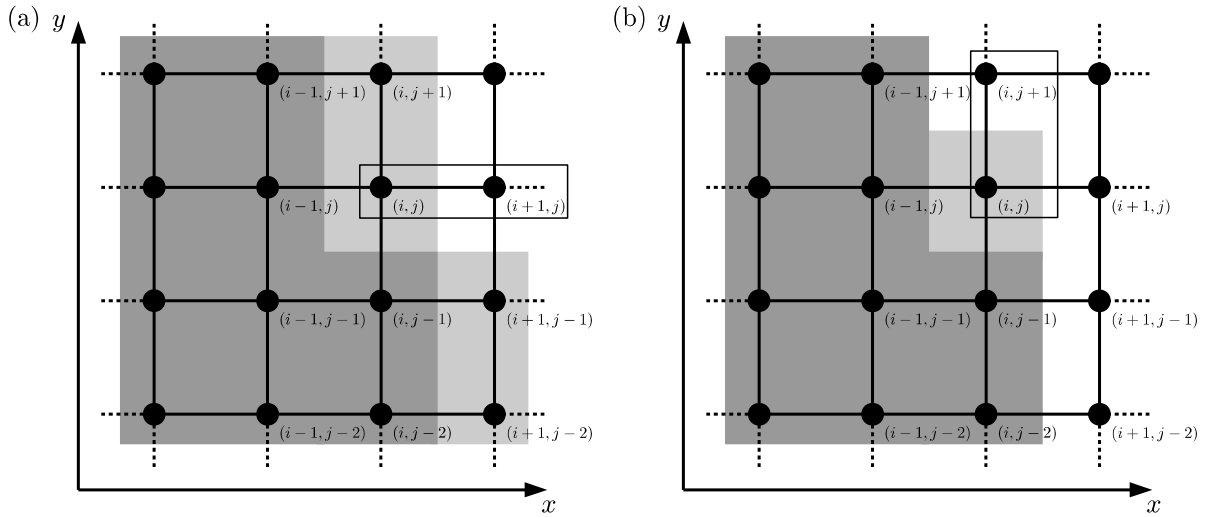


Abbildung 4.4: Bei der zweidimensionalen Jordan-Wigner-Transformation nach Azzouz zu berücksichtigende Positionen bei den auftretenden Produkten zweier Hard-Core-Boseoperatoren im Anteil des Hamiltonoperators, der die Wechselwirkung der Spins untereinander beschreibt, (a) für nächste Nachbarn in x -Richtung und (b) für nächste Nachbarn in y -Richtung. Dunkelgrau hinterlegte Positionen treten bei der Transformation beider Operatoren des Produkts auf, sodass sich ihre Beiträge gegenseitig aufheben. Hellgrau hinterlegte Positionen tauchen hingegen nur in der Transformationsvorschrift eines der beteiligten Operatoren auf. Ihr Beitrag verschwindet infolgedessen nicht. Es zeigt sich, dass Beiträge nächster Nachbarn in x -Richtung nichtlokal sind. Die Abbildungen wurden [235] nachempfunden.

Für Positionen, die nächste Nachbarn in y -Richtung sind (dargestellt in Abbildung 4.4 (b)), ergibt sich

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j+1}^\dagger = \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j+1}^\dagger, \quad (4.31a)$$

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j+1} = \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j+1}, \quad (4.31b)$$

$$\hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i,j+1}^\dagger = -\hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i,j+1}^\dagger, \quad (4.31c)$$

$$\hat{a}_{i,j} \hat{a}_{i,j+1} = -\hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i,j+1}. \quad (4.31d)$$

In beiden Fällen wurde genutzt

$$\hat{c}_{i,j}^\dagger \exp\{\imath\pi \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j}\} = \hat{c}_{i,j}^\dagger, \quad (4.32a)$$

$$\hat{c}_{i,j} \exp\{\imath\pi \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j}\} = -\hat{c}_{i,j}. \quad (4.32b)$$

Für dieselbe Position schließlich ist

$$\hat{a}_{i,j}^\dagger \hat{a}_{i,j} = \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j}. \quad (4.33)$$

Ausgedrückt über die c -Fermioperatoren lautet der Hamiltonoperator somit

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{J}{2} \sum_{i,j=1}^L \left\{ (\hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i+1,j}^\dagger + \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i+1,j} - \hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i+1,j}^\dagger - \hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i+1,j}) \exp\{\imath\pi \hat{C}_{i,j}^x\} \right. \\ & \left. + \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j+1}^\dagger + \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j+1} - \hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i,j+1}^\dagger - \hat{c}_{i,j} \hat{c}_{i,j+1} \right\} - h \sum_{i,j=1}^L \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j} + \frac{h}{2} N. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Der Hamiltonoperator ist im Gegensatz zum System in einer Dimension nach der Jordan-Wigner-Transformation nichtlokal aufgrund der Nichtlokalität der Operatoren $\hat{C}_{i,j}^x$. Diese umfassen im Limes $L \rightarrow \infty$ eine unendliche Anzahl an Positionen des Systems. Nach den zweidimensionalen Jordan-Wigner-Transformationen in zwei Dimensionen nach Fradkin bzw. Wang ist der Hamiltonoperator ebenfalls nichtlokal. Diese Nichtlokalität ist die Ursache dafür, dass keine kanonische Transformation auf ein System freier Fermionen existiert, die den Hamiltonoperator diagonalisiert.

4.4 System im thermischen Gleichgewicht

Da der Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nicht durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden kann, können thermische Erwartungswerte nicht auf die einfache Weise wie im Falle des eindimensionalen Systems in (3.196) berechnet werden. Stattdessen wird zu ihrer Bestimmung ein Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus angewendet, der die quantenmechanischen Erwartungswerte durch statistische Mittelwerte über verschiedene Konfigurationen des Systems approximiert. Die Beschreibung des Verfahrens orientiert sich an der Darstellung in [239]. Zur effizienten Erzeugung unabhängiger Konfigurationen, über die der Mittelwert gebildet wird, wird ein Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit nach Rieger und Kawashima verwendet [209]. Nach seiner Beschreibung werden die Erwartungswerte des renormierten Betrages der Magnetisierung und der Energie pro Spin für verschiedene Systemgrößen in Abhängigkeit von h/J und T/J berechnet. Mithilfe des Erwartungswertes der Energie wird anschließend die effektive Temperatur des Systems nach den beschriebenen Wechselwirkungs- und Feldquenchs bestimmt.

4.4.1 Thermische Erwartungswerte

Der Erwartungswert eines allgemeinen Operators $\hat{\mathcal{O}}$ lautet im kanonischen Gibbs-Ensemble bei der Temperatur T für ein System, das durch den Hamiltonoperator \hat{H} beschrieben wird,

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{Z_{\text{CGE}}} \text{Sp} \left\{ \hat{\mathcal{O}} e^{-\beta \hat{H}} \right\}. \quad (4.35)$$

$\beta = 1/T$ ist die inverse Temperatur und Z_{CGE} die kanonische Zustandssumme. Es werde ein allgemeiner Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ betrachtet, der aus zwei nicht miteinander kommutierenden Anteilen besteht, d. h. $[\hat{H}_1, \hat{H}_2] \neq 0$ und somit $e^{-\beta \hat{H}} \neq e^{-\beta \hat{H}_1} e^{-\beta \hat{H}_2}$. Durch das im Folgenden beschriebene Verfahren wird ein d -dimensionales quantenmechanisches System auf ein $(d+1)$ -dimensionales klassisches System abgebildet. Dieses Vorgehen wird als *Quantum-Classical Mapping* bezeichnet. Die zusätzliche Dimension ist durch die imaginäre Zeit gegeben. Ihre Ausdehnung entspricht der inversen Temperatur β . In dieser Darstellung werden die einzelnen Elemente des Systems durch sogenannte *Weltlinien* (World Lines) beschrieben. Die imaginäre Zeitachse werde zunächst in L_τ diskrete Zeitintervalle der Länge $\Delta\tau$ eingeteilt. Hierdurch ergeben sich Zeitscheiben (Time Slices), die die Konfiguration des Systems zu dem entsprechenden Zeitpunkt beschreiben. Ihre Anzahl L_τ hängt mit ihrer Ausdehnung $\Delta\tau$ in Richtung der Imaginärzeit gemäß $L_\tau = \beta/\Delta\tau$ zusammen. Damit ergibt sich

$$e^{-\beta \hat{H}} = (e^{-\Delta\tau \hat{H}})^{L_\tau}. \quad (4.36)$$

Für kleine Zeitintervalle $\Delta\tau$ kann die *Suzuki-Trotter-Zerlegung*

$$e^{-\Delta\tau \hat{H}} \approx e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} e^{-\Delta\tau \hat{H}_2}. \quad (4.37)$$

angewandt werden. Der Fehler der Näherung ist von der Ordnung $(\Delta\tau)^3$. Der Ausdruck (4.35) für den Erwartungswert des Operators $\hat{\mathcal{O}}$ im kanonischen Ensemble kann dann durch Einfügen quantenmechanischer Identitäten umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\text{CGE}}^T &= \frac{1}{Z_{\text{CGE}}} \sum_{\{\psi_i\}} \langle \psi_1 | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_2} | \psi_3 \rangle \prod_{i=2}^{L_\tau} \langle \psi_{2i-1} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_{2i} \rangle \langle \psi_{2i} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_2} | \psi_{2i+1} \rangle \\ &= \frac{1}{Z_{\text{CGE}}} \sum_{\{\psi_i\}} \frac{\langle \psi_1 | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2 \rangle} \prod_{i=1}^{L_\tau} \langle \psi_{2i-1} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_{2i} \rangle \langle \psi_{2i} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_2} | \psi_{2i+1} \rangle \\ &= \sum_{\{\psi_i\}} P_{\text{B}}[\{\psi_i\}] \frac{\langle \psi_1 | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2 \rangle} \end{aligned} \quad (4.38)$$

mit $\psi_{2L_\tau+1} = \psi_1$ und dem normierten Boltzmann-Gewicht

$$P_{\text{B}}[\{\psi_i\}] = \frac{1}{Z_{\text{CGE}}} \prod_{i=1}^{L_\tau} \langle \psi_{2i-1} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_{2i} \rangle \langle \psi_{2i} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_2} | \psi_{2i+1} \rangle. \quad (4.39)$$

Werden die Stichproben durch einen Monte-Carlo-Algorithmus mittels Importance Sampling erzeugt, so wird der Erwartungswert durch das arithmetische Mittel über die Stichproben (Samples) approximiert. Dieses wird mit $\langle\langle \rangle\rangle$ bezeichnet. Für M Stichproben ist somit der Monte-Carlo-Mittelwert des Erwartungswertes gegeben durch

$$\langle\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\langle \psi_1^{(j)} | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2^{(j)} \rangle}{\langle \psi_1^{(j)} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} | \psi_2^{(j)} \rangle}. \quad (4.40)$$

Durch zyklische Permutation innerhalb der Spur kann der Operator $\hat{\mathcal{O}}$ vor jede der auftretenden Exponentialfunktionen geschoben werden, sodass innerhalb einer jeden Stichprobe über alle $2L_\tau$ Matrixelemente der Weltlinie gemittelt werden kann und dadurch statistische Fluktuationen reduziert werden können. Es ergibt sich somit

$$\langle\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{2L_\tau M} \sum_{s=1}^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{L_\tau} \frac{\langle \psi_{2i-2+s}^{(j)} | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_s} | \psi_{2i-1+s}^{(j)} \rangle}{\langle \psi_{2i-2+s}^{(j)} | e^{-\Delta\tau \hat{H}_s} | \psi_{2i-1+s}^{(j)} \rangle}. \quad (4.41)$$

Ist der Operator, dessen Erwartungswert bestimmt werden soll, diagonal in der gewählten Darstellung, so vereinfacht sich obiger Ausdruck zu

$$\langle\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{2L_\tau M} \sum_{s=1}^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{L_\tau} \mathcal{O}(\psi_{2i-2+s}^{(j)}). \quad (4.42)$$

Dabei ist $\mathcal{O}(\psi_{2i-2+s}^{(j)}) = \langle \psi_{2i-2+s}^{(j)} | \hat{\mathcal{O}} e^{-\Delta\tau \hat{H}_s} | \psi_{2i-2+s}^{(j)} \rangle$. Für $\Delta\tau > 0$ ist die imaginäre Zeitachse diskret. Die Anzahl der Zeitscheiben ist durch $\beta/\Delta\tau$ gegeben und es wird für jede Stichprobe über die Erwartungswerte $\mathcal{O}(\psi_{2i-2+s}^{(j)})$ summiert. Wird nun der Grenzfall kontinuierlicher Imaginärzeit betrachtet, d. h. $\Delta\tau \rightarrow 0$, so wird τ eine kontinuierliche Variable mit $\tau \in [0, \beta]$. Die Summation über die Zeitscheiben ist folglich durch ein Integral über τ zu ersetzen und es ergibt sich für Operatoren, die in der gewählten Darstellung diagonal sind,

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \langle\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{2\beta M} \sum_{s=1}^2 \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{L_\tau} \mathcal{O}(\psi_{2i-2+s}^{(j)}) \Delta\tau = \frac{1}{\beta M} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \mathcal{O}(\psi^{(j)}(\tau)). \quad (4.43)$$

Ist der Operator $\hat{\mathcal{O}}$ hingegen nicht diagonal, so müssen vor Bildung des Grenzwertes $\Delta\tau \rightarrow 0$ in (4.41) alle auftretenden Fälle berechnet werden.

4.4.2 Anwendung auf das transversale Ising-Modell

Nach den allgemeinen Überlegungen zur Bestimmung der Erwartungswerte soll nun das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen betrachtet werden. In [240] wurde durch Suzuki gezeigt, dass das d -dimensionale quantenmechanische Ising-Modell auf das $(d+1)$ -dimensionale klassische Ising-Modell abgebildet werden kann. Für das zweidimensionale transversale Ising-Modell ist

$$\hat{H}_1 = -\frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x, \quad (4.44)$$

der Anteil des Hamiltonoperators, der die Wechselwirkung der Spins untereinander beschreibt, und

$$\hat{H}_2 = -\frac{h}{2} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \quad (4.45)$$

der Anteil, der die Wechselwirkung der Spins mit dem externen transversalen Feld beschreibt. Die Zustände $|\psi_j\rangle$ werden aus den Basiszuständen der \mathbf{x} -Basis gewählt. Die Operatoren des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie der Korrelationsfunktionen zweier Spins sind in dieser Basis diagonal. Bei der Bestimmung des Erwartungswertes der Energie ist der Anteil, der sich aus der Wechselwirkung der Spins untereinander ergibt, diagonal, der sich aus der Wechselwirkung der Spins mit dem externen

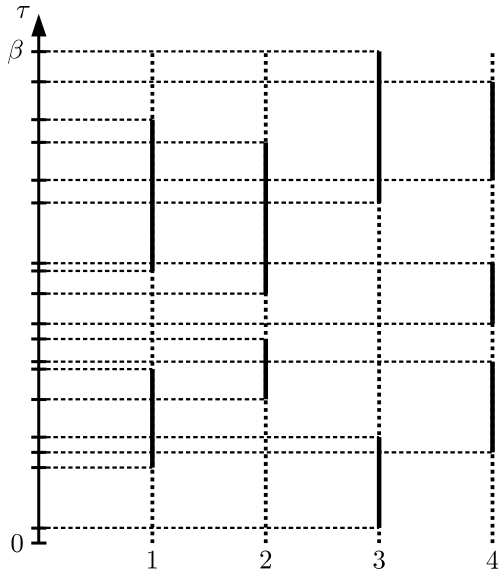


Abbildung 4.5: Darstellung einer Weltlinienkonfiguration am Beispiel des eindimensionalen transversalen Ising-Modell mit freien Randbedingungen bestehend aus vier Spins. Die imaginäre Zeit ist auf der Ordinate aufgetragen. Die Spins werden durch klassische Ising-Spinvariable $S_{\mathbf{R}}^x(\tau) = \pm 1$ beschrieben. Durchgezogene Linien bezeichnen Segmente der Weltlinien, entlang derer die zugehörige Spinvariable den Wert +1 hat, gestrichelte Linien Segmente, entlang derer die zugehörige Spinvariable den Wert -1 hat. Zeitpunkte, an denen sich eine Spinvariable ändert, d. h. Segmentgrenzen der entsprechenden Weltlinie, sind auf der imaginären Zeitachse markiert. Sie bestimmen die Zeitintervalle, innerhalb derer die Integrandenfunktion in der Darstellung der Observablen in kontinuierlicher Imaginärzeit konstant ist.

transversalen Feld ergebende Anteil hingegen nicht. Die Zeitscheiben in diskreter Imaginärzeit umfassen alle Spins des Systems zu einem festen Zeitpunkt, sind also von der Dimension d . Die Spins werden durch klassische Ising-Spinvariablen mit $S_{\mathbf{R}}^x(\tau_n) = \pm 1$ beschrieben mit $\tau_n = n \cdot \Delta\tau$. In kontinuierlicher Imaginärzeit ergibt sich $S_{\mathbf{R}}^x(\tau) = \pm 1$ und die Weltlinien der Spins werden in Segmente unterteilt, innerhalb derer die Spinvariable den konstanten Wert +1 oder -1 hat. Die Grenzen der Segmente, an denen die Spinvariable entlang einer Weltlinie ihre Orientierung ändert, werden als Segmentgrenzen (Cuts) bezeichnet. In Abbildung 4.5 ist für ein System aus vier Spins eine mögliche Weltlinienkonfiguration dargestellt. Durchgezogene Linien entlang der Weltlinien bezeichnen Segmente, entlang derer die Spinvariable den Wert +1 hat, gestrichelte Bereiche Segmente, entlang derer die Spinvariable den Wert -1 hat. Entlang der imaginären Zeitachse sind alle Zeitpunkte markiert, zu denen Segmentgrenzen auftreten, d. h. sich die Orientierung eines Spins ändert. Innerhalb dieser Zeitintervalle ist die Integrandenfunktion von (4.43) konstant. Dies erlaubt die Auswertung des Integrals durch Aufteilen des Integrationsintervalls $[0, \tau]$ in Zeitintervalle, innerhalb derer die Integrandenfunktion konstant ist, und Aufsummieren der Produkte aus der Länge der Zeitintervalle und dem Wert der Integrandenfunktion. Im Folgenden werden die konkreten Vorschriften zur Berechnung der verschiedenen Observablen angegeben und im Anschluss daran wird ein effizientes Verfahren zur Erzeugung der Stichproben für den Monte-Carlo-Mittelwert beschrieben.

Magnetisierung

Der Operator $\hat{\mu}_{\text{BR}}^x$, der den renormierten Betrag der Magnetisierung misst, ist in der \mathbf{x} -Basis diagonal. Der Monte-Carlo-Mittelwert seines thermischen Erwartungswertes kann somit unmittelbar in kontinuierlicher Imaginärzeit angegeben werden. Unter Verwendung des Monte-Carlo-Mittelwertes

$$\langle\langle \hat{\mu}_{\text{B}}^x \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{\beta MN} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \left| \sum_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) \right| \quad (4.46)$$

für den thermischen Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung ergibt sich

$$\langle\langle \hat{\mu}_{\text{BR}}^x \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{\langle\langle \hat{\mu}_{\text{B}}^x \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T - \mu_{\text{B,min}}^x}{1 - \mu_{\text{B,min}}^x}. \quad (4.47)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ ist gegeben durch

$$p_{\text{CGE}}^T(\mu_m^x) = \frac{1}{\beta M} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \delta \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) - \mu_m^x \right). \quad (4.48)$$

Dabei bezeichnet $\mu_m^x = \frac{N-m}{N}$ die Eigenwerte des Operators $\hat{\mu}^x$ der Magnetisierung in x -Richtung. m ist die Anzahl der Spin down eines betrachteten Basiszustandes der \mathbf{x} -Basis, d. h. $m = 0, 1, \dots, N$ für ein System bestehend aus N Spins. Die Anzahl der Eigenwerte beträgt somit $N + 1$. Sie liegen äquidistant im Intervall $[-1, 1]$. Im thermodynamischen Limes werden die μ_m^x kontinuierlich.

Im Limes $T \rightarrow \infty$ kann der Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung unmittelbar bestimmt werden ohne Notwendigkeit der Approximation als Monte-Carlo-Mittelwert. Es ist

$$\lim_{T \rightarrow \infty} e^{-\beta \hat{H}} = \hat{\mathbb{1}} \quad (4.49)$$

und damit

$$\lim_{T \rightarrow \infty} Z_{\text{CGE}} = 2^N. \quad (4.50)$$

Hieraus ergibt sich durch Bildung der Spur in der \mathbf{x} -Basis für den Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle \hat{\mu}_{\text{B}}^x \rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{2^N} \sum_x \langle x | \hat{\mu}_{\text{B}}^x | x \rangle. \quad (4.51)$$

Dies entspricht gerade dem Wert der unteren Schranke $\mu_{\text{B}, \text{min}}^x$ des Betrages der Magnetisierung in (2.12). Somit verschwindet der renormierte Betrag der Magnetisierung sowohl für $h/J \rightarrow \infty$ als auch für $T/J \rightarrow \infty$.

Korrelationsfunktionen

Die Operatoren $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ der Korrelationsfunktionen zweier Spins im Abstand \mathbf{r} sind ebenfalls diagonal in der \mathbf{x} -Basis. Für den Monte-Carlo-Mittelwert ergibt sich folglich in kontinuierlicher Imaginärzeit

$$\langle \langle \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle \rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{\beta M N_{\mathbf{r}}} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{x(j)}(\tau). \quad (4.52)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ lautet

$$p_{\text{CGE}}^T(\varepsilon_{\mathbf{r}}^{xx}) = \frac{1}{\beta M} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \delta \left(\frac{1}{N_{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{x(j)}(\tau) - C_{\mathbf{r}}^{xx} \right). \quad (4.53)$$

Die $\varepsilon_{\mathbf{r}}^{xx}$ sind die Eigenwerte von $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$. Sie liegen im Intervall $[-1, 1]$ und sind im thermodynamischen Limes kontinuierlich.

Energie

Bei der Bestimmung des Erwartungswertes der Energie ist zu beachten, dass nur der Anteil \hat{H}_1 des Hamiltonoperators, der den Energiebeitrag aus der Wechselwirkung der Spins untereinander beschreibt, in der \mathbf{x} -Basis diagonal ist. Der Anteil \hat{H}_2 hingegen, der die Wechselwirkung der Spins mit dem externen transversalen Feld beschreibt, ist in der \mathbf{x} -Basis nicht diagonal. Bei seiner Bestimmung muss somit von (4.41) ausgegangen werden. Zunächst werde jedoch der thermische Erwartungswert von \hat{H}_1 in kontinuierlicher Imaginärzeit angegeben. Abgesehen von dem Vorfaktor $-J$ stimmt dieser pro Spin mit dem Erwartungswert der Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn überein:

$$\langle \langle \hat{H}_1 \rangle \rangle_{\text{CGE}}^T = -\frac{J}{2\beta M} \sum_{j=1}^M \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) S_{\mathbf{R}'}^{x(j)}(\tau). \quad (4.54)$$

Für den Anteil \hat{H}_2 der Wechselwirkung der Spins mit dem externen transversalen Feld müssen vor Bildung des Grenzwertes $\Delta\tau \rightarrow 0$ zunächst in (4.41) alle erlaubten Fälle betrachtet werden. Hierbei erweist es sich als nützlich, die Operatoren $e^{-\Delta\tau \hat{H}_1}$ und $e^{-\Delta\tau \hat{H}_2}$ umzuschreiben gemäß

$$e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} = \prod_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} \left\{ \cosh \left(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2} \right) + \sinh \left(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2} \right) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x \right\}, \quad (4.55a)$$

$$e^{-\Delta\tau\hat{H}_2} = \prod_{\mathbf{R}} \left\{ \cosh\left(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}\right) + \sinh\left(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}\right) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \right\}. \quad (4.55b)$$

Da \hat{H}_2 eine Summe von Ein-Spin-Operatoren ist und $e^{-\Delta\tau\hat{H}_1}$ und $e^{-\Delta\tau\hat{H}_2}$ wie oben gezeigt faktorisieren, kann bei der Bestimmung des Erwartungswertes von \hat{H}_2 jede Position einzeln betrachtet und anschließend über die Positionen summiert werden. Da Beiträge für die anderen Positionen des Systems in

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{\langle \psi_{2i-1}^{(j)} | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z e^{-\Delta\tau\hat{H}_1} | \psi_{2i}^{(j)} \rangle}{\langle \psi_{2i-1}^{(j)} | e^{-\Delta\tau\hat{H}_1} | \psi_{2i}^{(j)} \rangle} \quad (4.56a)$$

bzw.

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{\langle \psi_{2i}^{(j)} | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z e^{-\Delta\tau\hat{H}_2} | \psi_{2i+1}^{(j)} \rangle}{\langle \psi_{2i}^{(j)} | e^{-\Delta\tau\hat{H}_2} | \psi_{2i+1}^{(j)} \rangle} \quad (4.56b)$$

als Faktoren sowohl im Zähler als auch im Nenner auftauchen, können sie gekürzt werden, sofern sie nicht unmittelbar null ergeben. Es verbleibt also

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\langle \psi_{2i-1, \mathbf{R}}^{(j)} | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \{ \cosh(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2}) + \sinh(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2}) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x \} | \psi_{2i, \mathbf{R}}^{(j)} \rangle}{\langle \psi_{2i-1, \mathbf{R}}^{(j)} | \{ \cosh(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2}) + \sinh(\Delta\tau \cdot \frac{J}{2}) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^x \} | \psi_{2i, \mathbf{R}}^{(j)} \rangle} \quad (4.57a)$$

und

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{\langle \psi_{2i, \mathbf{R}}^{(j)} | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \{ \cosh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) + \sinh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \} | \psi_{2i+1, \mathbf{R}}^{(j)} \rangle}{\langle \psi_{2i, \mathbf{R}}^{(j)} | \{ \cosh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) + \sinh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z \} | \psi_{2i+1, \mathbf{R}}^{(j)} \rangle} \quad (4.57b)$$

zu bestimmen. Der Index \mathbf{R} der Zustände besagt, dass nur die Orientierung des Spins an der Position \mathbf{R} zu betrachten ist. Es ergeben sich hieraus vier zu untersuchende Fälle, die durch die Orientierung des Spins an der Position \mathbf{R} in $\psi_{2i-1}^{(j)}$ und $\psi_{2i}^{(j)}$ bzw. $\psi_{2i}^{(j)}$ und $\psi_{2i+1}^{(j)}$ bestimmt sind. Hat der Spin an der Position \mathbf{R} in $\psi_{2i-1}^{(j)}$ und $\psi_{2i}^{(j)}$ die gleiche Orientierung, so verschwindet (4.57a), da der Zähler null ergibt. Ist seine Orientierung in den beiden Zuständen hingegen unterschiedlich, so liegt keine erlaubte Konfiguration vor, da der Nenner verschwindet. Aus den Summanden mit $e^{\Delta\tau\hat{H}_1}$ ergibt sich somit kein Beitrag zu dem Monte-Carlo-Mittelwert. (4.57b) hat im Fall, dass der Spin an der Position \mathbf{R} in $\psi_{2i}^{(j)}$ und $\psi_{2i+1}^{(j)}$ gleich orientiert ist, den Wert $-\frac{\hbar}{2} \tanh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2})$ und im Fall, dass er unterschiedlich orientiert ist, den Wert $-\frac{\hbar}{2} \coth(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2})$. Im Grenzfall $\Delta\tau \rightarrow 0$ ergibt sich somit

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \tanh(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) \Delta\tau = 0, \quad (4.58a)$$

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \coth(\Delta\tau \cdot \frac{\hbar}{2}) \Delta\tau = \frac{2}{\beta\hbar}, \quad (4.58b)$$

d. h. es existiert nur ein Beitrag, wenn sich die Orientierung des Spins in den beiden Zuständen unterscheidet. Der Beitrag eines Spins an der Position \mathbf{R} zur Energie des Systems ist somit für eine Konfiguration durch die Anzahl $N_{\text{seg}, \mathbf{R}}^{(j)}$ der Segmentgrenzen entlang seiner Weltlinie gegeben. Aus der Summation über alle Spins des Systems folgt, dass der Beitrag des Nichtdiagonalanteils des Hamiltonoperators für eine gegebene Weltlinienkonfiguration gerade der Gesamtzahl der Segmentgrenzen $N_{\text{seg}}^{(j)} = \sum_{\mathbf{R}} N_{\text{seg}, \mathbf{R}}^{(j)}$ entspricht, wobei keine explizite Abhängigkeit von h vorliegt:

$$\langle\langle \hat{H}_2 \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = -\frac{1}{\beta M} \sum_{j=1}^M N_{\text{seg}}^{(j)}. \quad (4.59)$$

Insgesamt ergibt sich also für den Monte-Carlo-Mittelwert der Energie des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T

$$\langle\langle \hat{H} \rangle\rangle_{\text{CGE}}^T = -\frac{1}{\beta M} \sum_{j=1}^M \left\{ \frac{J}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} S_{\mathbf{R}}^{x(j)}(\tau) S_{\mathbf{R}'}^{x(j)}(\tau) + N_{\text{seg}}^{(j)} \right\}. \quad (4.60)$$

Die Stärke des externen transversalen Feldes taucht in diesem Ausdruck nicht explizit auf. Sie erscheint nur über die Anzahl der Segmentgrenzen, wie sich in der folgenden Beschreibung der Bestimmung der Konfigurationen des Systems, über die der Monte-Carlo-Mittelwert gebildet wird, zeigen wird. Zuvor werden jedoch noch die Grenzfälle $T \rightarrow 0$ und $T \rightarrow \infty$ betrachtet. Für $T \rightarrow 0$ stimmt der Erwartungswert der Energie im System mit dem kleinsten Eigenwert des Hamiltonoperators überein, da sich das System im Grundzustand befindet. Ist hingegen $T \rightarrow \infty$, so folgt mit (4.49) und (4.50) und Bildung der Spur in der Basis $\{|n\rangle\}$ der Eigenzustände von \hat{H}

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle \hat{H} \rangle_{\text{CGE}}^T = \frac{1}{2^N} \sum_{\lambda} E_{\lambda} = 0. \quad (4.61)$$

Dabei ist E_{λ} der Eigenwert von \hat{H} zum Eigenzustand $|\Psi_{\lambda}\rangle$. Die Summation über alle Eigenenergien des Systems ergibt null.

4.4.3 Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit

Zur Bestimmung der Konfigurationen, über die der Monte-Carlo-Mittelwert gebildet wird, wird ein Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit verwendet, der auf Rieger und Kawashima zurückgeht [209]. Im Rahmen des Quantum-Classical Mapping wird die freie Energie F des Systems mithilfe der Suzuki-Trotter-Zerlegung geschrieben in der Form

$$F = -\frac{1}{\beta} \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \ln \left\{ \text{Sp} \left[\exp(-S_{\text{klassisch}}^x) \right] \right\}. \quad (4.62)$$

Dabei ist für den Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modell nach (4.1)

$$S_{\text{klassisch}}^x = -K \sum_{n, \langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} S_{\mathbf{R}}^x(\tau_n) S_{\mathbf{R}'}^x(\tau_n) - K' \sum_{n, \mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^x(\tau_n) S_{\mathbf{R}}^x(\tau_{n+1}) \quad (4.63)$$

mit

$$K = \Delta\tau \cdot \frac{J}{2}, \quad (4.64a)$$

$$K' = -\frac{1}{2} \ln \left\{ \left| \tanh(\Delta\tau \cdot \frac{h}{2}) \right| \right\}. \quad (4.64b)$$

Die $S_{\mathbf{R}}^x(\tau_n) = \pm 1$ bezeichnen den Wert der klassischen Ising-Spinvariable zum Zeitpunkt $\tau_n = n \cdot \Delta\tau$. Der zusätzliche Summationsindex n , der von 1 bis L_{τ} läuft, bezeichnet die L_{τ} Zeitscheiben, in die die imaginäre Zeitachse unterteilt ist. Die Wechselwirkung der Spins innerhalb einer Zeitscheibe wird durch K gemäß (4.64a) beschrieben, die Wechselwirkung zwischen Spins in verschiedenen Zeitscheiben durch K' gemäß (4.64b). Im Grenzfall kontinuierlicher Imaginärzeit, d. h. $\Delta\tau \rightarrow 0$, ergibt sich die Beschreibung der Spins durch Weltlinien mit Segmenten, innerhalb derer die Ising-Spinvariable den konstanten Wert $+1$ oder -1 hat. Die Erzeugung der Stichproben, über die die Monte-Carlo-Mittelwerte zur Approximation der gesuchten quantenmechanischen Erwartungswerte gebildet werden, erfolgt mithilfe einer Cluster-Methode nach Swendsen und Wang [241]. Der Algorithmus ist ergodisch und erfüllt die Bedingung der detaillierten Bilanz. Die Idee des Swendsen-Wang-Algorithmus besteht darin, bei der Aktualisierung der Konfiguration des Systems Spins zu Clustern zusammenzufassen, die anschließend gemeinsam umgeklappt werden. Benachbarte Spins mit gleicher Orientierung werden mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit in das Cluster eingebunden, wohingegen Spins mit unterschiedlicher Orientierung nicht in einem Cluster verknüpft werden. Für $\Delta\tau > 0$ beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass zwei parallele Spins $S_{\mathbf{R}}^x(\tau_n)$ und $S_{\mathbf{R}'}^x(\tau_n)$, die nächste Nachbarn sind, in einem Cluster zusammengefasst werden,

$$p = 1 - \exp \left\{ -2K \right\} = \Delta\tau \cdot J + \mathcal{O}(\Delta\tau^2). \quad (4.65)$$

Nächste Nachbarn entlang der imaginären Zeitachse werden mit der Wahrscheinlichkeit

$$p' = 1 - \exp \left\{ -2K' \right\} = 1 - \Delta\tau \cdot \frac{h}{2} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2) \quad (4.66)$$

verknüpft. Die Wahrscheinlichkeit dafür, die Spins entlang der imaginären Zeitachse an einer bestimmten Position \mathbf{R} des Systems über ein endliches Zeitintervall der Länge $\mathcal{T} < \beta$ zu verknüpfen, ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeit dafür, $\mathcal{T}/\Delta\tau$ Verknüpfungen zu erzeugen, d. h.

$$(p')^{\mathcal{T}/\Delta\tau} = \left(1 - \Delta\tau \cdot \frac{h}{2} \right)^{\mathcal{T}/\Delta\tau}. \quad (4.67)$$

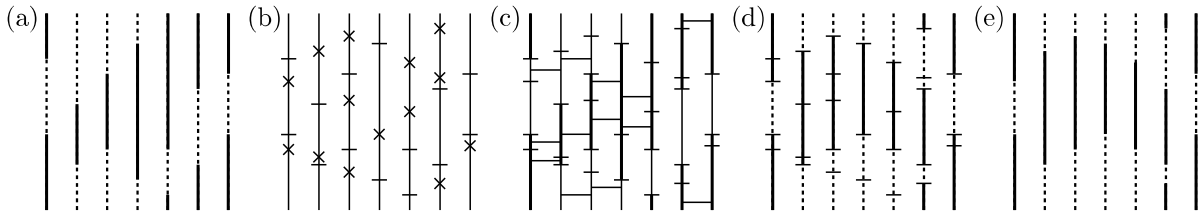


Abbildung 4.6: Illustration der Erzeugung der Konfigurationen des Systems mithilfe des Swendsen-Wang-Cluster-Algorithmus. (a) Konfiguration des Systems vor Aktualisierung der Konfiguration. Kontinuierliche Linien bezeichnen Segmente der Weltlinien mit Spin up, gestrichelte Linien Segmente der Weltlinien mit Spin down. (b) Erzeugung neuer Segmentgrenzen entlang der Weltlinien, dargestellt durch Kreuze, mit Wahrscheinlichkeit nach (4.68). (c) Verknüpfung von Segmenten benachbarter Spins mit gleicher Spinorientierung mit Wahrscheinlichkeit nach (4.70). (d) Erzeugung der Segmente entlang der Weltlinien, nachdem jedem Cluster mit gleicher Wahrscheinlichkeit der Wert $+1$ oder -1 zugewiesen wurde. (e) Entfernung redundanter Segmentgrenzen innerhalb von Segmenten. Die Abbildung wurde [209] nachempfunden.

Im Limes $\Delta\tau \rightarrow 0$ wird diese Wahrscheinlichkeit zu

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (p')^{\mathcal{T}/\Delta\tau} = \exp \left\{ -\frac{h}{2} \mathcal{T} \right\}. \quad (4.68)$$

Wird somit ein Weltliniensegment der Länge \mathcal{T} betrachtet, folgt die Erzeugung neuer Segmentgrenzen innerhalb dieses Segments einem Poisson-Prozess, der durch die Stärke des externen transversalen Feldes bestimmt wird. Segmente entlang der Weltlinien benachbarter Spins des Systems, beispielsweise $\bar{S}_{\mathbf{R}}^x \{[\tau_{\mathbf{R}}^+, \tau_{\mathbf{R}}^-]\}$ und $\bar{S}_{\mathbf{R}'}^x \{[\tau_{\mathbf{R}'}^+, \tau_{\mathbf{R}'}^-]\}$, können verknüpft werden, wenn die Orientierung der Spins in ihnen übereinstimmt und die Schnittmenge ihrer Zeitintervalle $[\tau_{\mathbf{R}}^+, \tau_{\mathbf{R}}^-] \cap [\tau_{\mathbf{R}'}^+, \tau_{\mathbf{R}'}^-]$ nicht leer ist. Diese Schnittmenge wird nun als \mathcal{T} bezeichnet. Die Wahrscheinlichkeit, die beiden Segmente nicht zu verknüpfen, lautet

$$(1 - p)^{\mathcal{T}/\Delta\tau} = (1 - \Delta\tau \cdot J)^{\mathcal{T}/\Delta\tau}. \quad (4.69)$$

Im Limes $\Delta\tau \rightarrow 0$ ergibt sich schließlich

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (1 - p)^{\mathcal{T}/\Delta\tau} = \exp \left\{ -J\mathcal{T} \right\}. \quad (4.70)$$

Es werden nun die erzeugten Cluster identifiziert und ihnen mit gleicher Wahrscheinlichkeit die Orientierungen $+1$ oder -1 zugewiesen. Hieraus ergeben sich neue Segmente entlang der Weltlinien. In ihnen vorhandene redundante Segmentgrenzen werden abschließend entfernt und die Observablen für die erzeugte Konfiguration bestimmt. In Abbildung 4.6 ist das Verfahren schematisch dargestellt für eine lineare Kette aus sieben Spins mit freien Randbedingungen.

4.4.4 Resultate

Zur Überprüfung des Monte-Carlo-Algorithmus zur Bestimmung der thermischen Erwartungswerte des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells im Gleichgewicht bei endlicher Temperatur T werden seine Resultate für den renormierten Betrag der Magnetisierung sowie die Energie des Systems pro Spins mit Resultaten aus der exakten Diagonalisierung des Hamiltonoperators verglichen. Da Quadratgitter betrachtet werden und im Falle der exakten Diagonalisierung die Kenntnis aller Eigenwerte und Eigenzustände des Systems erforderlich ist, wird aufgrund des Rechenaufwandes an dieser Stelle lediglich ein System der Größe 3×3 betrachtet, also auf die bisherige Forderung nach gerader Kantenlänge verzichtet. In Abbildung 4.7 ist der Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung als Funktion von T/J für verschiedene Verhältnisse h/J für das transversale Ising-Modell auf dem 3×3 -Gitter dargestellt. Abbildung 4.7(a) zeigt die Resultate der exakten Diagonalisierung des Hamiltonoperators, Abbildung 4.7(b) die Resultate des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Anhand der Abbildung wird die Wirkung der Einflussgrößen J , h und T auf die Ordnung innerhalb des Systems ersichtlich. Sowohl die Kopplung J der Spins

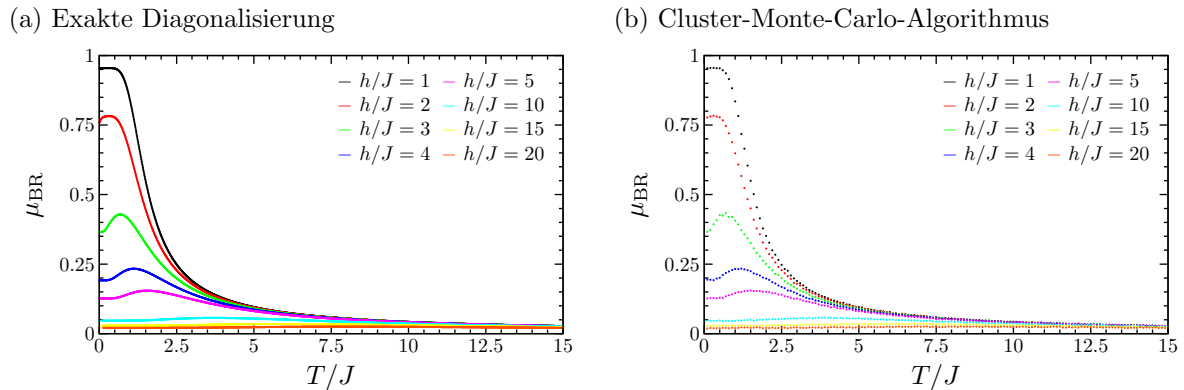


Abbildung 4.7: Erwartungswert des renormierten Betrages der Magnetisierung in x -Richtung als Funktion von T/J für verschiedene Verhältnisse h/J für ein System der Größe 3×3 bestimmt mithilfe (a) exakter Diagonalisierung und (b) des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit. Jeder Datenpunkt wurde aus 100000 Monte-Carlo-Samples bestimmt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Kurvenverläufe. Eine Erklärung des Verlaufs der Kurven als Funktion von J , h und T kann dem Haupttext entnommen werden.

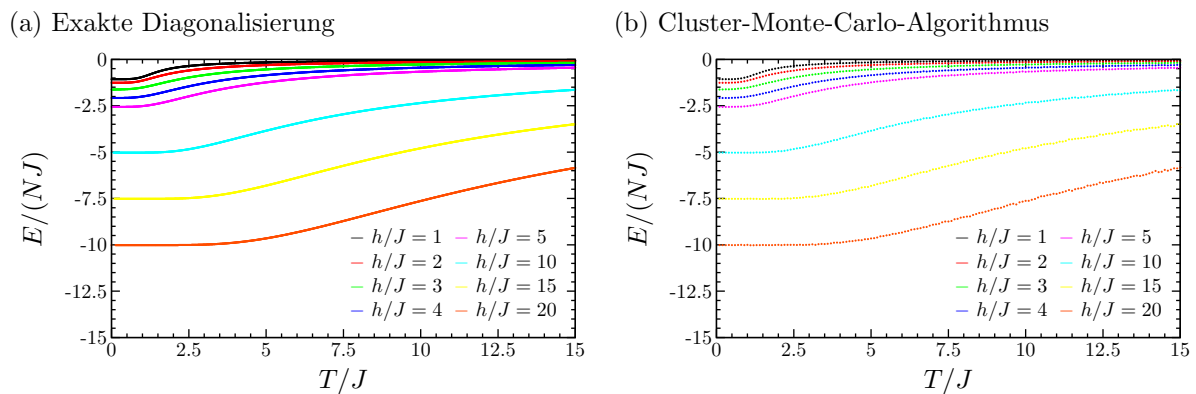


Abbildung 4.8: Erwartungswert der Energie pro Spin als Funktion von T/J für verschiedene Verhältnisse h/J für ein System der Größe 3×3 bestimmt mithilfe (a) exakter Diagonalisierung und (b) des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit. Jeder Datenpunkt wurde aus 100000 Monte-Carlo-Samples bestimmt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Kurvenverläufe.

untereinander als auch das externe Transversalfeld sind bestrebt, eine Ordnung innerhalb des Systems zu schaffen. Die Kopplung J versucht, die Spins parallel zueinander in x -Richtung auszurichten. Dabei ist nur die relative Orientierung der Spins zueinander von Bedeutung, es existiert keine Bevorzugung der positiven oder der negativen x -Richtung. Das externe transversale Feld hingegen versucht, die Spins entlang der positiven z -Richtung auszurichten. Die Kopplung J der Spins untereinander und das externe transversale Feld h wirken somit einander entgegen. Durch Erhöhung der Temperatur hingegen wird jegliche Ordnung innerhalb des Systems gestört. Sind die Spins bevorzugt parallel bzgl. der x -Richtung orientiert, d. h. ist J groß im Verhältnis zu h , so wird eine Erhöhung der Temperatur den Betrag der Magnetisierung in x -Richtung verringern. Ist hingegen h groß verglichen mit J , so sind die Spins bevorzugt in z -Richtung orientiert. Erhöhung von T stört diese Ordnung und erhöht somit für kleine T zunächst den Betrag der Magnetisierung in x -Richtung. Erst bei höheren Temperaturen fällt der renormierte Betrag der Magnetisierung in x -Richtung wieder ab und strebt für $T \rightarrow \infty$ wie vorhergesagt gegen null.

In Analogie zu den Betrachtungen des renormierten Betrages der Magnetisierung ist in Abbildung 4.8 der Verlauf des Erwartungswertes der Energie pro Spin in Abhängigkeit von J als Funktion von T/J für verschiedene Verhältnisse h/J für das 3×3 -System dargestellt. Wiederum zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung der Resultate der exakten Diagonalisierung und des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus.

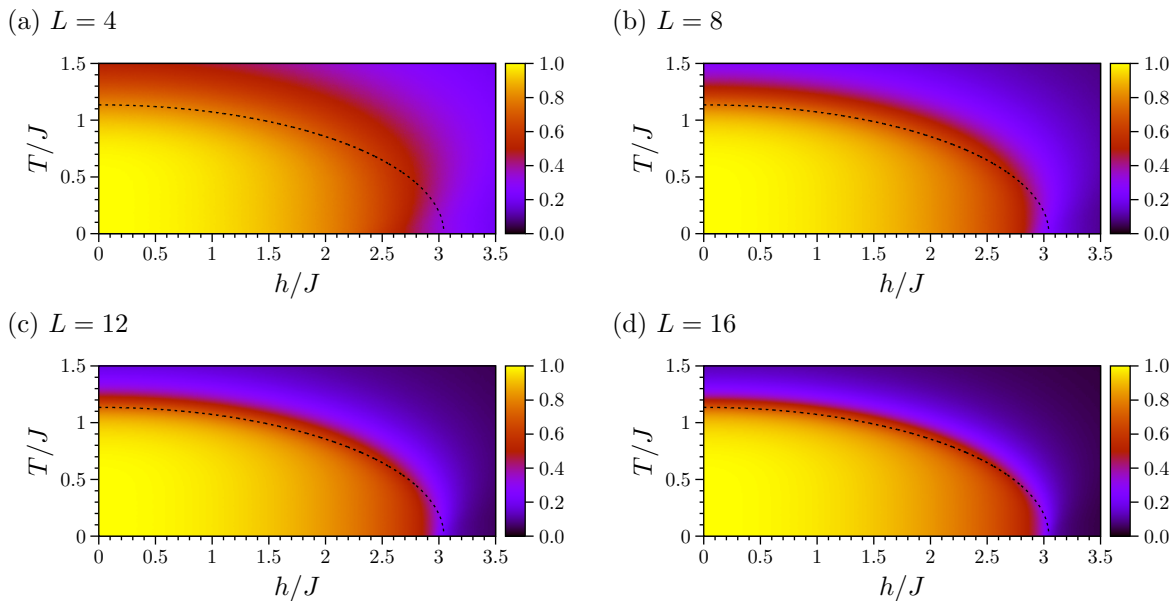


Abbildung 4.9: Erwartungswert des renormierten Betrages der Magnetisierung für das im thermischen Gleichgewicht befindliche zweidimensionale transversale Ising-Modell auf einem Quadratgitter der Kantenlänge (a) $L = 4$, (b) $L = 8$, (c) $L = 12$ und (d) $L = 16$ in Abhängigkeit von h/J und T/J . Durch die Wahl der Observable kann bereits für die betrachteten endlichen Systemgrößen der im thermodynamischen Limes durch spontane Symmetriebrechung entstehende Bereich ferromagnetischer Ordnung im Phasendiagramm identifiziert werden. Mit zunehmender Systemgröße nähert sich dieser den Resultaten für das System im thermodynamischen Limes an. Für dieses ist $(T/J)_{\text{crit}} \approx 1.135$ im Falle $h/J = 0$ [197] und $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$ im Falle $T/J = 0$ [194, 208, 209]. Die gestrichelte Linie beschreibt den Verlauf der Grenze zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase im thermodynamischen Limes.

Für $T \rightarrow \infty$ strebt der Erwartungswert der Energie wie vorhergesagt gegen null.

Nach der Überprüfung der Genauigkeit des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit zur Bestimmung der thermischen Erwartungswerte des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells im Gleichgewicht bei einer endlichen Temperatur T sollen nun die Phasendiagramme des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie der Energie pro Spin in Abhängigkeit von h/J und T/J für verschiedene Systemgrößen untersucht werden. In Abbildung 4.9 ist der renormierte Betrag der Magnetisierung in Abhängigkeit von h/J und T/J für verschiedene Systemgrößen dargestellt. Durch die Betrachtung des renormierten Betrages der Magnetisierung zeigt sich auch für endliche Systemgrößen der Bereich des Phasendiagramms, in dem im thermodynamischen Limes durch spontane Symmetriebrechung ferromagnetische Ordnung auftritt. Für verschwindendes Transversalfeldes wurde der Phasenübergang von Onsager in [197] zu $(T/J)_{\text{crit}} = 1/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 1.135$ bestimmt und für verschwindende Temperatur zu $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$ (Reihenentwicklung durch Pfeuty und Elliot in [194], Dichtematrixrenormierungsgruppe durch du Croo de Jongh und van Leeuwen in [208], Quanten-Monte-Carlo durch Rieger und Kawashima in [209]). Abseits dieser Spezialfälle kann der Phasenübergang zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase im thermodynamische Limes als Funktion von h/J und T/J mithilfe der Binder-Kumulante [242]

$$U = 1 - \frac{\langle (\hat{\mu}^x)^4 \rangle_{\text{CGE}}}{3 \langle (\hat{\mu}^x)^2 \rangle_{\text{CGE}}^2} \quad (4.71)$$

und Finite-Size-Scaling bestimmt werden. Im thermodynamische Limes ist

$$\lim_{N \rightarrow \infty} U = \begin{cases} \frac{2}{3} & \text{für } (T/J) < (T/J)_{\text{crit}} \\ 0 & \text{für } (T/J) > (T/J)_{\text{crit}} \end{cases} \quad (4.72)$$

Die gestrichelte Linie in den Phasendiagrammen in Abbildung 4.9 beschreibt den Verlauf der Grenze zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase im thermodynamischen Limes. Ein

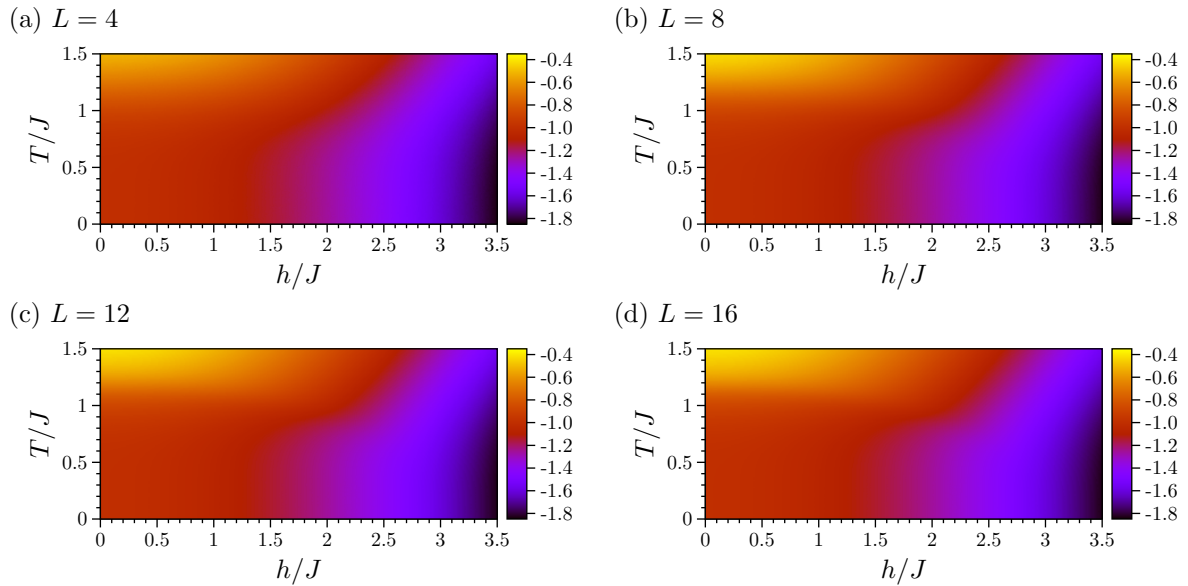


Abbildung 4.10: Erwartungswert der Energie pro Spin in Einheiten der Kopplungskonstante J für das im thermischen Gleichgewicht befindliche zweidimensionale transversale Ising-Modell auf einem Quadratgitter der Kantenlänge (a) $L = 4$, (b) $L = 8$, (c) $L = 12$ und (d) $L = 16$ in Abhängigkeit von h/J und T/J . Aus den Phasendiagrammen kann die effektive Temperatur des Systems nach den Quenchprotokollen bestimmt werden. Es zeigt sich nur eine geringe Abhängigkeit der Energie pro Spin von der Systemgröße im Gegensatz zum renormierten Betrag der Magnetisierung in Abbildung 4.9.

Vergleich der Resultate des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus für verschiedenen Systemgrößen zeigt, dass sie sich bereits für $L = 16$ nahe an den Resultaten für das System im thermodynamischen Limes befinden. Bei noch größeren Systemen ergeben sich nur noch geringfügige Verbesserungen. Für die kleineren Systemgrößen hingegen zeigen sich deutliche Abweichungen. Nach den Betrachtungen zur Magnetisierung des System im Gleichgewicht bei endlicher Temperatur soll nun der Erwartungswert der Energie untersucht werden. In Abbildung 4.10 ist dieser in Einheiten der Kopplungskonstante J für verschiedene Systemgrößen pro Spin in Abhängigkeit von h/J und T/J dargestellt. Im Gegensatz zum renormierten Betrag der Magnetisierung weist der Erwartungswert der Energie nur eine geringe Abhängigkeit von der Systemgröße auf. Es zeigt sich, dass die Energieisolinien im Phasendiagramm einen Wendepunkt aufweisen, der auf der Grenze zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase liegt. Für das 16×16 -System ist in Abbildung 4.11 (a) der Verlauf mehrerer Energieisolinien dargestellt. In Abbildung 4.11 (b) sind die Energieisolinien im Phasendiagramm des renormierten Betrages der Magnetisierung eingezeichnet, um das Auftreten der Wendepunkte am Phasenübergang zu veranschaulichen.

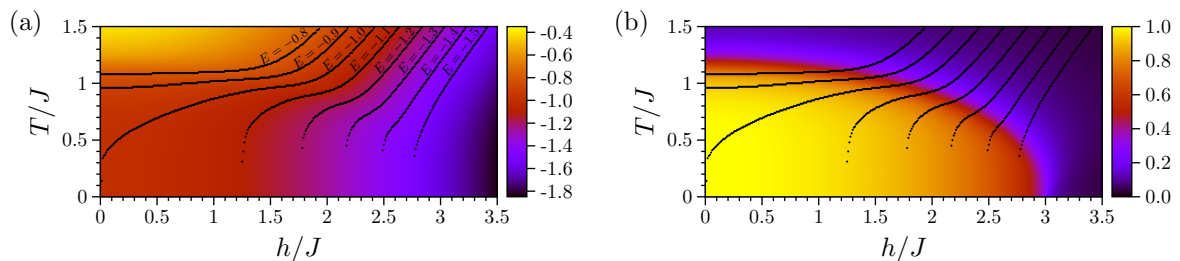


Abbildung 4.11: Phasendiagramme (a) des Erwartungswertes der Energie pro Spin in Einheiten von J sowie (b) des renormierten Betrages der Magnetisierung für das transversale Ising-Modell auf dem 16×16 -Gitter. Die in den Graphen eingezeichneten Energieisolinien weisen jeweils einen Wendepunkt auf, der auf der Grenze zwischen der ferromagnetischen und der paramagnetischen Phase liegt.

4.5 Effektive Temperatur

Mithilfe der thermischen Erwartungswerte der Energie des Systems kann nun im Folgenden die effektive Temperatur des Systems nach den Wechselwirkungs- und Feldquenchs bestimmt. Für die Wechselwirkungsquenchs wurde gezeigt, dass der Erwartungswert der Energie pro Spin nach dem Quench $-h/2$ beträgt. Die effektive Temperatur des Systems ist also dadurch bestimmt, dass für sie der thermische Erwartungswert des Hamiltonoperators nach dem Quench mit den Parametern J und h gerade $-h/2$ ist. Für die Feldquenchs hingegen ist der Erwartungswert der Energie pro Spin nach dem Quench durch $-J$ gegeben. Die Bestimmung der effektiven Temperatur aus dem Verlauf der Energie pro Spin ist in Abbildung 4.12 veranschaulicht. Zu diesem Zweck ist die Energie pro Spin in Einheiten der Kopplungskonstante J für verschiedene Verhältnisse h/J als Funktion von T/J aufgetragen.

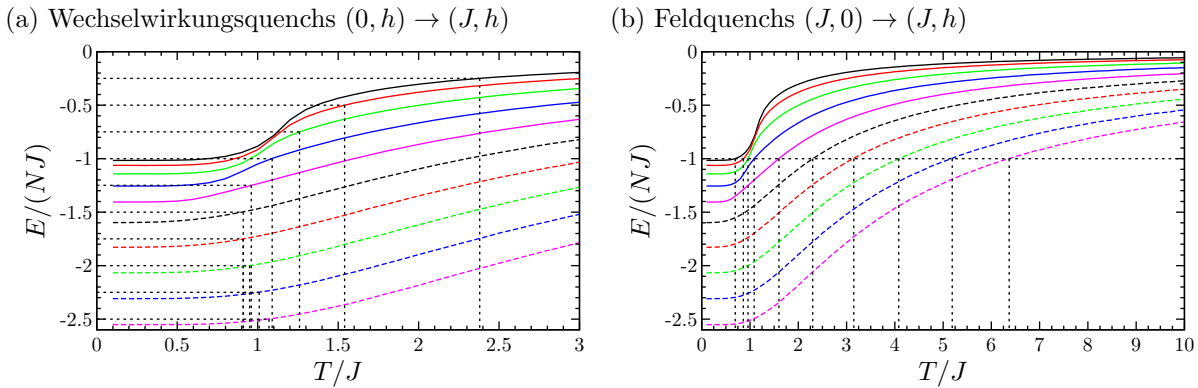


Abbildung 4.12: Bestimmung der effektiven Temperatur des Systems nach (a) den Wechselwirkungsquenchs und (b) den Feldquenchs für verschiedenen Verhältnisse h/J . Im Falle der Wechselwirkungsquenchs muss der Erwartungswert der Energie pro Spin bei der effektiven Temperatur den Wert $-h/2$ haben, im Falle der Felquenchs den Wert $-J$. Der Farbcode lautet $- h/J = 0.5$, $- h/J = 1$, $- h/J = 1.5$, $- h/J = 2.0$, $- h/J = 2.5$ im Falle der durchgezogenen Linien und $- h/J = 3.0$, $- h/J = 3.5$, $- h/J = 4.0$, $- h/J = 4.5$, $- h/J = 5.0$ im Falle der gestrichelten Linien.

In Abbildung 4.13 sind die sich aus der Bedingung der Übereinstimmung der Energien ergebenden effektiven Temperaturen des Systems nach den Wechselwirkungsquenchs gemäß (4.15) sowie nach den Feldquenchs gemäß (4.19) als Funktion von h/J für verschiedene Systemgrößen aufgetragen. Der Verlauf der effektiven Temperatur nach den Wechselwirkungsquenchs in Abbildung 4.13 (a) zeigt, dass das System durch das Einschalten einer Kopplung zwischen den Spins nicht in die ferromagnetischen Phase überführt werden kann, d. h. aus dem vollständig ungeordneten Zustand in Bezug auf die x -Richtung keine langreichweitige ferromagnetische Ordnung in x -Richtung entstehen kann. Der Einfluss der Systemgröße auf den Verlauf der effektiven Temperatur nach den Wechselwirkungsquenchs ist nur gering. Lediglich in der Nähe des Phasenüberganges zeigen das 4×4 -System und in geringerem Maße das 8×8 -System Abweichungen von den Resultaten für die beiden größeren Systemgrößen. Die Resultate für das 12×12 -System und das 16×16 -System stimmen nahezu überein. Ursache für die für die kleineren Systemgrößen beobachteten Abweichungen insbesondere in der Nähe des Phasenüberganges ist die dort divergierende Korrelationslänge. Unter der Korrelationslänge ist in diesem Zusammenhang der typische Durchmesser von Spinclustern innerhalb des Systems zu verstehen. Die Korrelationslänge übersteigt in der Nähe des Phasenüberganges die Systemgröße und verursacht dadurch die Abweichungen. Ist die Korrelationslänge hingegen kleiner als die Systemgröße, so ergeben sich keine Änderungen mehr mit weiter ansteigender Systemgröße. In der paramagnetischen Phase verschwindet die Korrelationslänge mit zunehmendem Abstand vom Phasenübergang. Weiterhin weist der Verlauf der effektiven Temperatur ein Minimum auf. Der Wert von h/J , für den dieses Minimum auftritt, nähert sich mit wachsender Systemgröße dem kritischen Verhältnis $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$, für den das System im Gleichgewicht bei $T = 0$ von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase übergeht.

Für die Feldquenchs kann Abbildung 4.13 (b) entnommen werden, dass das System für Quenchs hin zu $h/J \gtrsim (h/J)_{\text{crit}}/2$ die ferromagnetischen Phase verlässt. Ein Vergleich des Verlaufs der effektiven Temperatur in Abhängigkeit von h/J für verschiedene Systemgrößen zeigt, dass innerhalb der ferromagnetischen

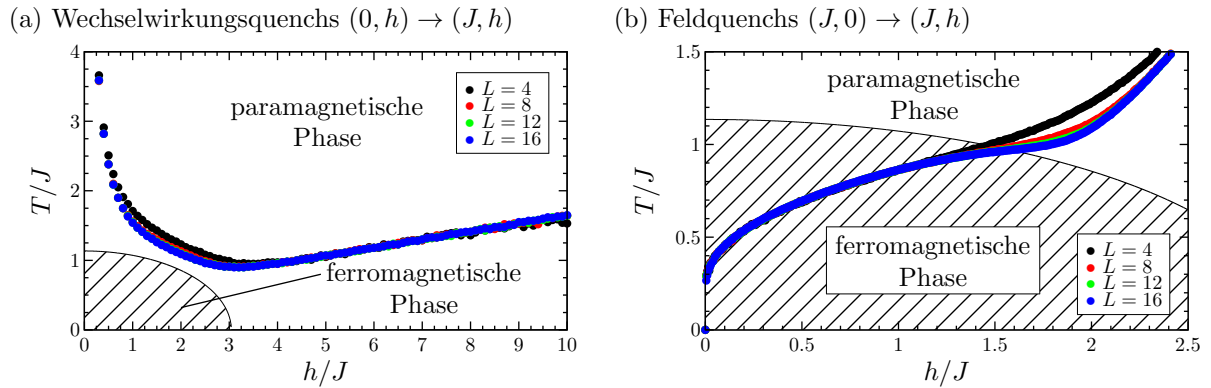


Abbildung 4.13: Effektive Temperatur des Systems (a) nach den Wechselwirkungsquenchs und (b) nach den Feldquenchs bestimmt gemäß (4.22) für verschiedene Systemgrößen. Für die Wechselwirkungsquenchs muss der thermische Erwartungswert der Energie pro Spin bei der effektiven Temperatur des Systems $-h/2$ betragen, für die Feldquenchs $-J$. Abbildung (a) zeigt, dass das System durch die Wechselwirkungsquenchs nicht in die ferromagnetische Phase gelangen kann. Abbildung (b) kann entnommen werden, dass für Feldquenchs zu Werten $h/J \approx (h/J)_{\text{crit}}/2$ das System die ferromagnetische Phase verlässt.

Phase die Systemgröße nahezu keinen Einfluss auf die effektive Temperatur hat. Wird das System durch den Quench näher an den Phasenübergang gebracht, so nehmen die Abweichungen zwischen den verschiedenen Systemgrößen zu. Ursache hierfür ist wiederum die divergierende Korrelationslänge. In der paramagnetischen Phase nähern sich die effektiven Temperaturen für die verschiedenen Werte von L nach den Feldquenchs wieder an.

Der qualitative Verlauf der effektiven Temperatur nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs kann unter Berücksichtigung des Verlauf der Energie des Systems in Abhängigkeit von der Temperatur für ein vorgegebenes Verhältnis h/J verstanden werden. Hierzu wird wiederum Abbildung 4.12 betrachtet. Die Grundzustandsenergie des Systems bei $T = 0$ fällt monoton mit steigendem Verhältnis h/J ab. Für $h/J = 0$ beträgt die Energie pro Spin $-J$. Die Kopplung zwischen den Spins bleibt für kleine Verhältnisse von h/J in der ferromagnetischen Phase der dominierende Beitrag zur Gesamtenergie. Mit weiter zunehmendem Verhältnis h/J entfernt sich die Grundzustandsenergie des Systems pro Spin immer weiter von $-J$ und strebt im Limes eines unendlich starken Transversalfeldes von unten gegen $-h/2$. Eine Betrachtung des Verlaufs des Erwartungswertes der Energie pro Spin als Funktion der Temperatur für festes Verhältnis h/J zeigt, dass die Energie monoton mit der Temperatur ansteigt. Im Grenzfall $T/J \rightarrow \infty$ strebt der Erwartungswert der Energie wie in (4.61) gezeigt wurde von unten gegen 0 unabhängig vom Verhältnis h/J . Für kleine Temperaturen hingegen existiert ein Temperaturbereich, in dem die Temperatur nahezu keinen Einfluss auf den Erwartungswert der Energie des Systems hat. Wie Abbildung 4.12 entnommen werden kann, ist dieser Temperaturbereich umso ausgeprägter, je weiter das Verhältnis h/J vom kritischen Punkt $(h/J)_{\text{crit}}$ entfernt ist. Dies kann wiederum durch die Ordnung im System und die Beeinflussung dieser durch die Temperatur erklärt werden. Für kleine Verhältnisse h/J werden die Spins durch die Kopplung untereinander bevorzugt parallel zueinander in x -Richtung ausgerichtet. Für große Verhältnisse h/J hingegen ist eine Orientierung in Richtung des externen transversalen Feldes in z -Richtung energetisch günstiger. Die Temperatur stört die Ordnung der Spins, indem sie Fluktuationen der Orientierung der Spins hervorruft. Je stärker die Ordnung in x - bzw. z -Richtung innerhalb des Systems ausgeprägt ist, d. h. je weiter h/J vom kritischen Punkt entfernt ist, desto schwieriger ist es für die Temperatur, die Ordnung zu stören. Aus diesem Grund ist der Temperaturbereich für kleine Temperaturen, in dem der Erwartungswert der Energie durch Erhöhung der Temperatur des Systems kaum geändert wird, umso ausgeprägter, je weiter das System vom kritischen Punkt entfernt ist. Dieses Verhalten hat Einfluss auf die effektive Temperatur des Systems nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs.

Für die Wechselwirkungsquenchs ist die effektive Temperatur des Systems nach dem Quench dadurch bestimmt, dass der Erwartungswert der Energie pro Spin $-h/2$ betragen muss. Für kleine Verhältnisse h/J strebt der Erwartungswert der Energie pro Spin bei $T = 0$ gegen $-J$, liegt also deutlich unterhalb von $-h/2$. Zudem sind aufgrund der stärker ausgeprägten Ordnung der Spins in x -Richtung höhere Temperaturen erforderlich, bevor die Energie ansteigt. Aus diesen Gründen nimmt die effektive Temperatur

des System nach Wechselwirkungsquenchs mit kleinem Verhältnis h/J zu und divergiert für $h/J \rightarrow 0$, da der Energieerwartungswert null nur für $T \rightarrow \infty$ erreicht wird. Werden nun Wechselwirkungsquenchs mit großem Verhältnis h/J betrachtet, so liegt der Erwartungswert der Energie pro Spin bei $T = 0$ nur geringfügig unterhalb dem in der Bestimmungsgleichung der effektiven Temperatur geforderten Wert von $-h/2$. In diesem Fall ist jedoch die Ordnung der Spins in z -Richtung entlang des Transversalfeldes stark ausgeprägt und es sind dementsprechend wiederum hohe Temperaturen erforderlich, bevor der Erwartungswert der Energie des Systems ansteigt. Somit steigt die effektive Temperatur des Systems nach Wechselwirkungsquenchs auch für große Verhältnisse h/J an. Das Minimum der effektiven Temperatur nach den Wechselwirkungsquenchs liegt nahe dem kritischen Punkt $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$, da für dieses Verhältnis von h/J aufgrund der nur schwach ausgeprägten Ordnung der Spins innerhalb des Systems im Vergleich zu größeren und kleineren Verhältnissen die geringste Temperatur erforderlich ist, bevor der Erwartungswert der Energie von seinem Wert für $T = 0$ ansteigt. Dieser Effekt dominiert gegenüber der Tatsache, dass für größere Verhältnisse h/J der Erwartungswert der Energie pro Spin bereits näher an $-h/2$ liegt, sodass sich das Minimum der effektiven Temperatur nach den Wechselwirkungsquenchs in Abbildung 4.13 (a) nahe am kritischen Punkt befindet.

Im Falle der Feldquenchs ist die effektive Temperatur des Systems nach dem Quench dadurch bestimmt, dass der Erwartungswert der Energie pro Spin $-J$ betragen muss. Hieraus ergibt sich unter Beachtung der Absenkung der Grundzustandsenergie bei $T = 0$ mit zunehmendem Verhältnis h/J ein monotoner Anstieg der effektiven Temperatur des Systems nach den Feldquenchs in Abhängigkeit von h/J . Für $h/J \rightarrow \infty$ divergiert die effektive Temperatur. Im Falle $h/J \rightarrow 0$ wird die effektive Temperatur durch zwei Effekte beeinflusst. Einerseits nähert sich der Erwartungswert der Energie des Systems pro Spin für kleine Temperaturen immer weiter dem Wert $-J$ von unten an. Andererseits sind für immer kleinere Verhältnisse von h/J immer größere Temperaturen erforderlich, um die Ordnung der Spins in x -Richtung zu stören und zu einem Anstieg des Erwartungswertes der Energie des Systems zu führen. Der Verlauf der effektiven Temperatur in Abbildung 4.13 (b) zeigt, dass der erste Effekt dominiert. Die effektive Temperatur des Systems nach den Feldquenchs strebt somit für $h/J \rightarrow 0$ gegen null, wobei der Wert der effektiven Temperatur von null für $h/J = 0$ exakt bekannt ist. Anschaulich kann dieses Verhalten derart verstanden werden, dass kleinere Verhältnisse h/J zu schwächeren Feldquenchs gehören und somit eine geringere effektive Temperatur des Systems nach dem Quench bewirken.

4.6 Zeitentwicklung - Überblick

Nach den Betrachtungen zum zweidimensionalen transversalen Ising-Modell im thermischen Gleichgewicht und der Bestimmung der effektiven Temperatur des Systems nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs soll sich nun der Untersuchung seiner Zeitentwicklung zugewandt werden. Wie bereits gezeigt wurde, kann der Hamiltonoperator des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nicht durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden. Aus diesem Grund kann die für das eindimensionale transversale Ising- und XY-Modell beschriebene Freie-Fermionen-Technik nicht angewendet werden und es ist somit nicht möglich, die Zeitentwicklung des Systems für Systemgrößen exakt zu beschreiben, die über diejenigen hinausgehen, die mittels numerischer Diagonalisierung des Hamiltonoperators oder numerischer Integration der Schrödingergleichung behandelt werden können. Aufgrund des exponentiellen Wachstums der Dimension des Hilbertraumes mit der Anzahl der Spins des Systems gemäß $\dim(\mathcal{H}) = 2^N$ erreichen diese Verfahren bereits für relativ kleine Systemgrößen ihre Grenzen. Für die im Rahmen der Dissertation verwendeten, aus den Numerical Recipes in C++ [219] entnommenen Algorithmen liegen diese Grenzen für die betrachteten Quadratgitter bei 3×3 im Falle der exakten Diagonalisierung des Hamiltonoperators zur Bestimmung aller Eigenwerte und Eigenzustände bzw. 5×5 bei der numerischen Integration der Schrödingergleichung. Eine weitere Konsequenz der Nichtdiagonalisierbarkeit des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen besteht darin, dass die für das Modell in einer Dimension hergeleitete semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses nach dem Quench ebenfalls nicht angewendet werden kann, da keine wohldefinierten nicht wechselwirkenden Quasiteilchen existieren. Die Teilchenzahl der Quasiteilchen wäre somit keine Erhaltungsgröße unter der unitären Zeitentwicklung. Dies ist auch zu erwarten, da für das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen aufgrund seiner Nichtintegrabilität die Gesamtenergie die einzige Erhaltungsgröße darstellt. Eine semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses müsste also eine Wechselwirkung der Quasiteilchen untereinander berücksichtigen sowie ihre nicht erhaltene Besetzungszahl. Weiterhin wäre die Bewegungsrichtung der Quasiteilchen in zwei Dimensionen im Gegensatz zum eindimensionalen Modell nicht a priori ersichtlich.

Aus den oben genannten Gründen ergibt sich somit für das zweidimensionale transversale Ising-Modell die Notwendigkeit neuer, approximativer Verfahren zur Beschreibung seiner Nichtgleichgewichtsdynamik. Obwohl die numerische Diagonalisierung des Hamiltonoperators und die numerische Integration der Schrödingergleichung auf kleine Systeme beschränkt sind, werden sie bei der Überprüfung der Genauigkeit dieser Näherungsverfahren eine wichtige Rolle spielen. Eines der Standardverfahren zur Beschreibung nicht exakt lösbarer Systeme stellt Störungsrechnung dar. Mit ihrer Hilfe kann für kleine Zeiten und im Falle, dass einer der Parameter des Hamiltonoperators klein ist gegenüber den anderen Parametern und er somit als Störung betrachtet werden kann, die Zeitentwicklung des Systems bestimmt werden. Im folgenden Kapitel wird die Anwendung zeitabhängiger Störungsrechnung auf das System nach den Feldquenchs beschrieben werden. Diese Ergebnisse wurden in Zusammenarbeit mit Jonas Hafner erzeugt und in Teilen bereits im Rahmen seiner Masterarbeit [225] veröffentlicht. Eine Alternative zur zeitabhängigen Störungstheorie stellt eine Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators dar. Diese wurde beispielsweise von Hamerla und Uhrig in [88–90] auf das Hubbard-Modell angewendet, liefert jedoch, wie durch Jonas Hafner in [225] gezeigt wurde, im Falle des transversalen Ising-Modells in einer und in zwei Dimensionen für die erreichbaren Ordnungen der Entwicklung schlechtere Ergebnisse als die zeitabhängige Störungstheorie. Weiterhin wurde von Jonas Hafner in [225] ein Verfahren entwickelt, welches basierend auf zeitabhängiger Mean-Field-Theorie auf Grundlage der BBGKY-Hierarchie (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon-Hierarchie) eine Näherung für die Zeitentwicklung des Systems nach den Feldquenchs beschreibt. Dieses Verfahren erlaubt die Betrachtung großer Systeme sowie die Untersuchung lokaler Quenchs, d. h. Quenchs, die die Parameter des Hamiltonoperators positionsabhängig ändern, kann jedoch nicht die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren bestimmen. Es wird im Folgenden daher nur zur Untersuchung der Ausbreitung einer lokalen Störung genutzt werden. Ein ähnliches Verfahren wurde auch von Pucci *et al.* in [223] auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell angewendet. Ein weiteres Verfahren zur Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells stellt die Erweiterung der ursprünglich für eindimensionale Systeme entwickelten zeitabhängigen Dichtematrixrenormierungsgruppe (t-DMRG) auf zwei Dimensionen dar. Dies kann z. B. durch die Verwendung von Matrixproduktzuständen (Matrix Product States, MPS) erreicht werden [57]. Ein in [42, 52] beschriebenes Vorgehen schließlich bildet die Dynamik quantenmechanischer Spinsysteme auf ein System stochastischer Differen-

tialgleichungen ab, deren Anzahl linear mit der Anzahl der Spins im System anwächst. Das Verfahren erlaubt die Betrachtung großer Systeme beliebiger Dimensionalität sowie eine Abschätzung des Fehlers der Resultate, jedoch nimmt dieser bereits für Zeiten, die zu kurz sind, um Mittelwerte über sie zu bestimmen, so stark zu, dass ein Vergleich von Zeitmittel und Ensemblemittel nicht möglich ist. Im Folgenden wird daher zur Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells und seines stationären Zustandes auf das Auftreten von Thermalisierung neben der zeitabhängigen Störungsrechnung ein Verfahren verwendet, welches auf Variations-Monte-Carlo in Realzeit (Real-Time Variational Monte Carlo, rt-VMC) basiert. Das Verfahren geht zurück auf Carleo *et al.* [98, 99, 224]. Im weiteren Verlauf der Dissertation wird seine Anwendung auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell beschrieben und mit seiner Hilfe die Zeitentwicklung verschiedener Observablen nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs bestimmt. Es wird sich zeigen, dass mithilfe geeigneter Variationszustände die Zeitentwicklung des Systems nach den Quenchs mit hoher Genauigkeit beschrieben werden kann. Die Kombination von erreichbarer Systemgröße, Genauigkeit der Beschreibung der Zeitentwicklung und Länge der Zeitintervalle in Verbindung mit der Anwendbarkeit auf höherdimensionale Systeme wird von keinem der zuvor genannten Verfahren erreicht. Zudem sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren unmittelbar zugänglich, sodass bei der Untersuchung des Auftretens von Thermalisierung auch die zeitlichen Mittelwerte der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System nach Quenchs mit denjenigen für das System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur verglichen werden können. Bevor das Variations-Monte-Carlo-Verfahren zur Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells angewendet wird, werde im folgenden Kapitel jedoch zunächst auf die störungstheoretische Beschreibung des Relaxationsprozesses eingegangen.

4.7 Zeitabhängige Störungstheorie

In diesem Kapitel soll für das zweidimensionale transversale Ising-Modell im thermodynamischen Limes die Zeitentwicklung der Magnetisierung

$$\mu^x(t) = \langle \hat{\mu}^x \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{\mu}^x | \Psi(t) \rangle \quad (4.73)$$

nach den Feldquenchs mithilfe zeitabhängiger Störungsrechnung untersucht werden. Der Anfangszustand des Systems ist somit durch

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\rangle_x \quad (4.74)$$

gegeben. Die Betrachtungen erfolgen im Wechselwirkungsbild, welches auch als Diracbild bezeichnet wird. In diesem wird der Hamiltonoperator in einen ungestörten Anteil und einen zeitabhängigen Störterm aufgespalten. Für die Feldquenchs stellt der Anteil des Hamiltonoperators, der die Wechselwirkung der Spins untereinander beschreibt, den ungestörten Anteil dar. Bei dem zum Zeitpunkt $t=0$ eingeschalteten externen transversalen Feld handelt es sich um die zeitabhängige Störung. Der Hamiltonoperator kann somit geschrieben werden in der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) . \quad (4.75)$$

Dabei ist $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{int}}$ und $\hat{V}(t) = \hat{H}_{\text{ext}} \cdot \Theta(t)$ mit

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{i,j}^x \left\{ \hat{\sigma}_{i+1,j}^x + \hat{\sigma}_{i,j+1}^x \right\} , \quad (4.76a)$$

$$\hat{H}_{\text{ext}} = -\frac{h}{2} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{i,j}^z . \quad (4.76b)$$

Die Integralgleichung des Zeitentwicklungsoperators lautet im Wechselwirkungsbild

$$\hat{U}(t,0) = \hat{\mathbb{1}} - i \int_0^t dt' \hat{V}(t') \hat{U}(t',0) . \quad (4.77)$$

Durch iteratives Einsetzen des Zeitentwicklungsoperators ergibt sich die sogenannte Dyson-Reihe

$$\hat{U}(t,0) = \hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \dots \int_0^{t'_{n-1}} dt'_n \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \dots \hat{V}(t'_n) . \quad (4.78)$$

Mit ihr folgt für die Zeitentwicklung des Zustandes des Systems im Wechselwirkungsbild

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0) |\Psi(0)\rangle = \left(\hat{\mathbb{1}} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \dots \int_0^{t'_{n-1}} dt'_n \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \dots \hat{V}(t'_n) \right) |\Psi(0)\rangle . \quad (4.79)$$

Zur Bestimmung des Zustandes des Systems zum Zeitpunkt t im Rahmen der zeitabhängigen Störungsrechnung ist somit die Zeitentwicklung des Störterms $\hat{V}(t)$ erforderlich. Diese wird im Wechselwirkungsbild durch \hat{H}_0 bestimmt. Für $t > 0$ ist

$$\hat{V}(t) = e^{i\hat{H}_{\text{int}}t} \hat{H}_{\text{ext}} e^{-i\hat{H}_{\text{int}}t} . \quad (4.80)$$

Da die einzelnen Summanden von \hat{H}_{int} kommutieren, faktorisiert $e^{i\hat{H}_{\text{int}}t}$. Alle Faktoren, die nicht $\hat{\sigma}_{i,j}^x$ enthalten, können an $\hat{\sigma}_{i,j}^z$ vorbeigezogen werden. Es verbleibt somit

$$\hat{V}(t) = -\frac{h}{2} \sum_{i,j} e^{-i\frac{J}{2}\hat{\sigma}_{i,j}^x [\hat{\sigma}_{i+1,j}^x + \hat{\sigma}_{i-1,j}^x + \hat{\sigma}_{i,j+1}^x + \hat{\sigma}_{i,j-1}^x]} t \hat{\sigma}_{i,j}^z e^{i\frac{J}{2}\hat{\sigma}_{i,j}^x [\hat{\sigma}_{i+1,j}^x + \hat{\sigma}_{i-1,j}^x + \hat{\sigma}_{i,j+1}^x + \hat{\sigma}_{i,j-1}^x]} t . \quad (4.81)$$

Aus $\hat{\sigma}_{i,j}^x \hat{\sigma}_{i,j}^z = -\hat{\sigma}_{i,j}^z \hat{\sigma}_{i,j}^x$ ergibt sich

$$e^{-i\frac{J}{2}\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t\hat{\sigma}_{i,j}^z = \hat{\sigma}_{i,j}^z e^{i\frac{J}{2}\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t \quad (4.82)$$

und somit schließlich

$$\hat{V}(t) = -\frac{\hbar}{2} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_{i,j}^z e^{iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t. \quad (4.83)$$

Durch die periodischen Randbedingungen stimmt die Magnetisierung an jeder Position des Systems überein und aufgrund des verwendeten Verfahrens ist keine Mittelung über die Positionen des Systems erforderlich. Es genügt somit die Betrachtung einer einzelnen Position, die mit (m, n) bezeichnet werde. Dann ist

$$\begin{aligned} \mu^x(t) &= \langle \Psi(0) | \hat{\sigma}_{m,n}^x | \Psi(0) \rangle && \left. \vphantom{\mu^x(t)} \right\} \mathcal{O}(h^0) \\ &- \int_0^t dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \langle \Psi(0) | \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_2) \hat{V}(t'_1) | \Psi(0) \rangle \\ &+ \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_2) | \Psi(0) \rangle \\ &- \int_0^t dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \hat{\sigma}_{m,n}^x | \Psi(0) \rangle \\ &+ \int_0^t dt'_4 \int_0^{t'_4} dt'_3 \int_0^{t'_3} dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \langle \Psi(0) | \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_4) \hat{V}(t'_3) \hat{V}(t'_2) \hat{V}(t'_1) | \Psi(0) \rangle \\ &- \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_3 \int_0^{t'_3} dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_4 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_3) \hat{V}(t'_2) \hat{V}(t'_4) | \Psi(0) \rangle \\ &+ \int_0^t dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_3 \int_0^{t'_3} dt'_4 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_3) \hat{V}(t'_4) | \Psi(0) \rangle \\ &- \int_0^t dt'_3 \int_0^{t'_3} dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_4 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \hat{V}(t'_3) \hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{V}(t'_4) | \Psi(0) \rangle \\ &+ \int_0^t dt'_4 \int_0^{t'_4} dt'_3 \int_0^{t'_3} dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_1 \langle \Psi(0) | \hat{V}(t'_1) \hat{V}(t'_2) \hat{V}(t'_3) \hat{V}(t'_4) \hat{\sigma}_{m,n}^x | \Psi(0) \rangle \\ &+ \mathcal{O}(h^6). \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\mu^x(t)} \right\} \mathcal{O}(h^2) \quad (4.84) \quad \left. \vphantom{\mu^x(t)} \right\} \mathcal{O}(h^4)$$

In dieser Entwicklung verschwinden alle ungeraden Ordnungen, da ein Spin nur durch die Wirkung von \hat{H}_{ext} umgeklappt werden kann. Damit die Erwartungswerte in den Integranden nicht verschwinden, muss jeder Spinumklapp wieder rückgängig gemacht werden. Dies ist nur für gerade Ordnungen möglich. Die Auswertung der Integrale erfolgt durch Einsetzen von (4.83) und anschließendes Vertauschen der Reihenfolge der Operatoren in den Erwartungswerten. Ziel ist es, zunächst alle Operatoren, für die $|\Psi(0)\rangle$ ein Eigenzustand ist, nach rechts zu bringen, um sie auf den Zustand anwenden zu können. Im ersten Schritt werden alle $e^{iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t$ nach rechts gezogen. Dabei ist zu beachten, dass sich das Vorzeichen von $\hat{\sigma}_{i,j}^x$ im Argument der Exponentialfunktion ändert beim Vertauschen mit $\hat{\sigma}_{i,j}^z$:

$$e^{iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t\hat{\sigma}_{i,j}^z = \hat{\sigma}_{i,j}^z e^{-iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t, \quad (4.85a)$$

$$e^{iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t\hat{\sigma}_{i+1,j}^z = \hat{\sigma}_{i+1,j}^z e^{iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[-\hat{\sigma}_{i+1,j}^x+\hat{\sigma}_{i-1,j}^x+\hat{\sigma}_{i,j+1}^x+\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t, \quad (4.85b)$$

⋮

$|\Psi(0)\rangle$ ist Eigenzustand der Operatoren $e^{\pm iJ\hat{\sigma}_{i,j}^x[\pm\hat{\sigma}_{i+1,j}^x\pm\hat{\sigma}_{i-1,j}^x\pm\hat{\sigma}_{i,j+1}^x\pm\hat{\sigma}_{i,j-1}^x]}t$. Die Eigenwerte werden vor den Erwartungswert gezogen. Sie stellen im Folgenden die eigentlichen Integranden dar, da nur sie eine Zeitabhängigkeit aufweisen. Zur weiteren Auswertung der Erwartungswerte in den Integranden wird der Operator $\hat{\sigma}_{m,n}^x$ nach rechts gezogen. Hierbei ist wiederum $\hat{\sigma}_{m,n}^x \hat{\sigma}_{m,n}^z = -\hat{\sigma}_{m,n}^z \hat{\sigma}_{m,n}^x$ zu beachten. $|\Psi(0)\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{\sigma}_{m,n}^x$ zum Eigenwert 1. Im Erwartungswert verbleiben somit nur noch Operatoren $\hat{\sigma}_{i,j}^z$. Die möglichen Werte des verbleibenden Erwartungswertes sind somit 0 und 1. Der Wert

1 wird angenommen, wenn die Anzahl der auf Position (i, j) des Systems wirkenden Operatoren gerade ist. Anschaulich betrachtet bedeutet dies, dass jeder Spin, der umgeklappt wird, auch wieder in seine ursprüngliche Orientierung gebracht werden muss, damit der Erwartungswert nicht verschwindet. Aus diesem Grund verschwinden auch die ungeraden Ordnungen in der Entwicklung. Es verbleibt somit noch die Bestimmung der Integrale. Dies kann mithilfe eines Computeralgebraprogrammes erfolgen, das symbolische Integration beherrscht, beispielsweise mithilfe von Maple. Unter Beachtung aller möglichen Konfigurationen ergibt sich schließlich bei Entwicklung bis zur 8. Ordnung für die Zeitentwicklung der Magnetisierung im Rahmen der zeitabhängigen Störungsrechnung

$$\begin{aligned}
\mu^x(t) = & 1 \\
& - \left(\frac{h}{4J}\right)^2 \cdot \left[1 - \cos(4Jt)\right] \\
& + \left(\frac{h}{4J}\right)^4 \cdot \left[\frac{16}{9} \cos(6Jt) - \frac{7}{3} \cos(4Jt) + \frac{16}{3} \cos(2Jt) + 6Jt \sin(4Jt) - \frac{43}{9}\right] \\
& - \left(\frac{h}{4J}\right)^6 \cdot \left[\frac{13}{32} \cos(8Jt) + \frac{34}{3} \cos(6Jt) + \frac{137}{18} \cos(4Jt) + \frac{26}{9} \cos(2Jt) + \frac{5}{4} Jt \sin(8Jt) + \frac{113}{3} Jt \sin(4Jt) + 48Jt \sin(2Jt)\right. \\
& \quad \left.+ 24J^2t^2 \cos(4Jt) + 3J^2t^2 - \frac{2135}{96}\right] \\
& + \left(\frac{h}{4J}\right)^8 \cdot \left[\frac{13}{960} \cos(12Jt) - \frac{12287}{8100} \cos(10Jt) + \frac{481817}{19200} \cos(8Jt) + \frac{401333}{5400} \cos(6Jt) - \frac{7469867}{129600} \cos(4Jt) + \frac{6062303}{16200} \cos(2Jt)\right. \\
& \quad - \frac{196}{135} Jt \sin(10Jt) + \frac{6817}{480} Jt \sin(8Jt) + \frac{4936}{45} Jt \sin(6Jt) + \frac{269717}{4320} Jt \sin(4Jt) + \frac{30251}{45} Jt \sin(2Jt) \\
& \quad + \frac{281}{48} J^2t^2 \cos(8Jt) - \frac{224}{9} J^2t^2 \cos(6Jt) + \frac{13213}{72} J^2t^2 \cos(4Jt) - \frac{388}{3} J^2t^2 \cos(2Jt) - \frac{4801}{144} J^2t^2 \\
& \quad \left.+ \frac{65}{18} J^3t^3 \sin(8Jt) - 3J^3t^3 \sin(4Jt) + \frac{1993}{432} J^3t^3 \sin(2Jt) + \frac{36}{3} J^4t^4 \cos(4Jt) + \frac{4}{3} J^4t^4 - \frac{71623969}{172800}\right] \\
& + \mathcal{O}(h^{10})
\end{aligned} \tag{4.86}$$

Die zeitabhängige Störungsrechnung stellt somit für das zweidimensionale transversale Ising-Modell eine Entwicklung in Ordnungen von $\frac{h}{4J}$ dar. Der Faktor 4 rührt von der Anzahl der nächsten Nachbarn eines Spins her. Für ein System allgemeiner Dimensionalität d erfolgt die Entwicklung somit in Ordnungen von $\frac{h}{2dJ}$. Demgegenüber stellt die Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators $e^{-i\hat{H}t}$, wie in [225] gezeigt wurde, eine Entwicklung in Ordnungen der Zeit t dar. Um einen Vergleich zum transversalen Ising-Modell in einer Dimension zu ermöglichen, ist nachfolgend auch für dieses die Entwicklung der Magnetisierung mithilfe zeitabhängiger Störungsrechnung dargestellt. Aufgrund des geringeren Rechenaufwandes bedingt dadurch, dass jeder Spin nur zwei nächste Nachbarn hat, kann für das Modell in einer Dimension die Entwicklung bis zur 10. Ordnung ausgeführt werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mu^x(t) = & 1 \\
& - \left(\frac{h}{2J}\right)^2 \cdot \left[1 - \cos(2Jt)\right] \\
& + \left(\frac{h}{2J}\right)^4 \cdot \left[\cos(2Jt) + 3Jt \sin(2Jt) - 2J^2t^2 \cos(2Jt) - 2J^2t^2 - 1\right] \\
& - \left(\frac{h}{2J}\right)^6 \cdot \left[-2 \cos(2Jt) - \frac{11}{2} Jt \sin(2Jt) + 5J^2t^2 \cos(2Jt) + J^2t^2 + 4J^3t^3 \sin(2Jt) - \frac{4}{3} J^4t^4 \cos(2Jt) - \frac{4}{3} J^4t^4 + \frac{17}{8}\right] \\
& + \left(\frac{h}{2J}\right)^8 \cdot \left[\frac{9}{16} \cos(4Jt) + 5 \cos(2Jt) + \frac{5}{8} Jt \sin(4Jt) + \frac{11}{8} Jt \sin(2Jt) - \frac{1}{4} J^2t^2 \cos(4Jt) - \frac{55}{4} J^2t^2 \cos(2Jt) - \frac{7}{4} J^2t^2\right. \\
& \quad \left.- \frac{31}{3} J^3t^3 \sin(2Jt) + 5J^4t^4 \cos(2Jt) + 2J^4t^4 + 2J^5t^5 \sin(2Jt) - \frac{4}{9} J^6t^6 \cos(2Jt) - \frac{8}{9} J^6t^6 - \frac{89}{16}\right] \\
& + \left(\frac{h}{2J}\right)^{10} \cdot \left[\frac{279}{128} \cos(4Jt) + 14 \cos(2Jt) + \frac{113}{32} Jt \sin(4Jt) + \frac{1263}{32} Jt \sin(2Jt) - \frac{45}{16} J^2t^2 \cos(4Jt) - \frac{655}{16} J^2t^2 \cos(2Jt) - \frac{31}{8} J^2t^2\right. \\
& \quad - \frac{5}{4} J^3t^3 \sin(4Jt) - \frac{379}{12} J^3t^3 \sin(2Jt) + \frac{1}{4} J^4t^4 \cos(4Jt) + \frac{69}{4} J^4t^4 \cos(2Jt) + 4J^4t^4 + \frac{23}{3} J^5t^5 \sin(2Jt) \\
& \quad \left.- \frac{22}{9} J^6t^6 \cos(2Jt) - \frac{14}{9} J^6t^6 - \frac{8}{15} J^7t^7 \sin(2Jt) + \frac{4}{45} J^8t^8 \cos(2Jt) + \frac{4}{9} J^8t^8 - \frac{2071}{128}\right] \\
& + \mathcal{O}(h^{12})
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Ein Vergleich der Entwicklungen für das ein- und das zweidimensionale transversale Ising-Modell zeigt, dass bei der Betrachtung des Modells in einer Dimension eine stärkere Zeitabhängigkeit der Beiträge zu einer gegebenen Ordnung besteht. Für das zweidimensionale Modell wachsen die führenden Terme mit zeitabhängiger Amplitude zur Ordnung n mit t^{n-4} an. Eine Ausnahme stellt die 4. Ordnung dar, für die eine Abhängigkeit mit t besteht. Demgegenüber wachsen für das eindimensionale Modell die Amplituden in führender Ordnung mit t^{n-2} an.

Eine Betrachtung obiger Ausdrücke für die zeitabhängige Störungsrechnung zeigt, dass in der Entwicklung sowohl zeitunabhängige Terme, algebraisch mit der Zeit anwachsende Terme als auch Sinus- und Cosinus-Schwingungen mit konstanter bzw. algebraisch mit der Zeit anwachsender Amplitude auftreten. Die Kreisfrequenzen der Schwingungen sind durch geradzahlige Vielfache der Kopplungskonstante

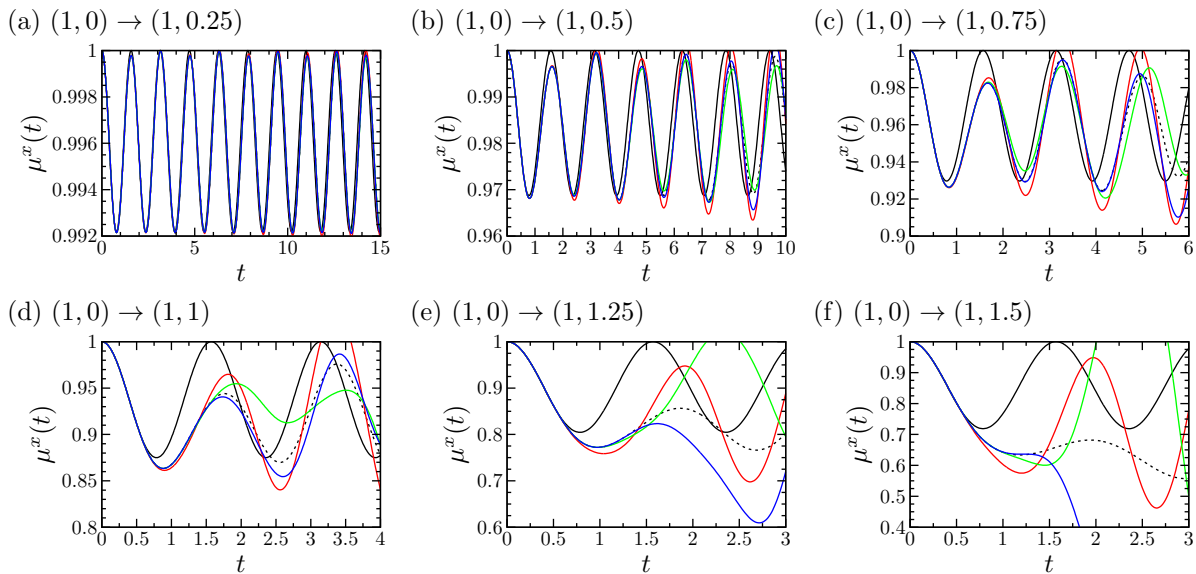


Abbildung 4.14: (a)-(f) Zeitentwicklung der Magnetisierung $\mu^x(t) = \langle \hat{\mu}^x \rangle_t$ nach verschiedenen Feldquenches in $-2.$, $-4.$, $-6.$ und $-8.$ Ordnung zeitabhängiger Störungsrechnung für das System im thermodynamischen Limes. Die gestrichelte Linie stellt die mithilfe numerischer Integration für ein 4×4 -System exakt bestimmte Zeitentwicklung der Magnetisierung ausgehend vom Zustand (4.74) dar. Durch Bestimmung des Zeitpunktes, an dem der Kurvenverlauf der Störungsrechnung in n -ter Ordnung von demjenigen in $(n-2)$ -ter Ordnung abweicht, kann das Zeitintervall ermittelt werden, in dem die Störungsrechnung die Zeitentwicklung des Systems korrekt beschreibt.

J gegeben. Die zeitabhängige Störungsrechnung weist somit den Vorteil auf, dass sie schon unmittelbar Schwingterme miteinschließt im Gegensatz zu der Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators.

In Abbildung 4.14 ist die Zeitentwicklung der Magnetisierung nach verschiedenen Feldquenches ausgehend von $h_0 = 0$ bis zur 8. Ordnung zeitabhängiger Störungsrechnung für das zweidimensionale transversale Ising-Modell dargestellt. Durch Vergleich des Verlaufs der Kurven für verschiedene Ordnungen kann das Zeitintervall bestimmt werden, in dem die Störungsrechnung die Zeitentwicklung korrekt beschreibt. Die Resultate der n -ten Ordnung sind bis zu dem Zeitpunkt verlässlich, zu dem sich Abweichungen von der Zeitentwicklung in $(n-2)$ -ter Ordnung ergeben. Zusätzlich ist für das 4×4 -System die durch numerische Integration der Schrödingergleichung mithilfe eines Runge-Kutta-Verfahrens 4. Ordnung bestimmte Zeitentwicklung der Magnetisierung ausgehend von dem Zustand in (4.74) dargestellt. Ein Vergleich der verschiedenen Ordnungen der Störungsrechnung für die betrachteten Quenchprotokolle zeigt, dass mit zunehmender Quenchstärke für eine gegebene Ordnung der Störungsrechnung die Länge des Zeitintervalls abnimmt, in dem die Zeitentwicklung des Systems gut approximiert wird. Mit zunehmender Quenchstärke müssen immer höhere Ordnungen berücksichtigt werden, um für ein vorgegebenes Zeitintervall die Zeitentwicklung des Systems korrekt zu beschreiben. Für den schwächsten betrachteten Quench $(1,0) \rightarrow (1,0.25)$ zeigt sich, dass die Zeitentwicklung der Magnetisierung bereits durch die zweite Ordnung der Störungsrechnung, die einer harmonischen Schwingung mit Kreisfrequenz $4J$ und konstanter Amplitude $[h/(4J)]^2$ entspricht, für das dargestellte Zeitintervall gut beschrieben wird. Der zeitliche Verlauf der Magnetisierung wird somit in guter Näherung durch eine harmonische Schwingung approximiert. Dies steht im Gegensatz zum transversalen Ising-Modell in einer Dimension, für das sich nach anfänglichen, schnell abklingenden Oszillationen auch für schwache Quenches ein exponentieller Abfall der Magnetisierung ergibt. Für stärkere Feldquenches zeigen sich zunehmende Abweichungen von einer harmonischen Schwingung, da für diese bereits für kürzere Zeiten die höheren Ordnungen der Entwicklung von zunehmender Bedeutung sind. Ein Vergleich mit den exakten Resultaten zeigt, dass sich für die Zeitintervalle, in denen die 6. und 8. Ordnung der zeitabhängigen Störungsrechnung übereinstimmen, sich auch keine Abweichungen von den exakten Resultaten für das kleine System ergeben. Für diese Quenchprotokolle und Zeitintervalle verhält sich das 4×4 -System somit schon wie das System im thermodynamischen Limes.

Die bisherigen Betrachtungen zur Störungstheorie haben sich mit der Magnetisierung des Systems nach den Feldquenchs befasst. Die Anwendung des Verfahrens zur Berechnung der gleichzeitige Korrelationsfunktion $\langle \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle_t$ zweier Spins ergibt sich unmittelbar. Statt einer Position des Systems sind in diesem Fall zwei Positionen zu betrachten, deren Abstand gerade \mathbf{r} beträgt. Für die Wechselwirkungsquenchs ist eine störungstheoretische Beschreibung ebenfalls möglich. In dieser würde der Wechselwirkungsterm des Hamiltonoperators die Störung darstellen. Die Rechnungen würden in der z -Basis ausgeführt, in der die x -Komponente eines Pauli-Spinoperators einen Spin umklappt. Da der Störterm nun Produkte zweier Operatoren umfasst, würden sich die Rechnungen aufwändiger gestalten als die hier beschriebenen nach den Feldquenchs. Sowohl die Betrachtungen zur gleichzeitigen Korrelationsfunktion als auch die Betrachtungen zu den Wechselwirkungsquenchs sollen an dieser Stelle jedoch nicht genauer ausgeführt werden. Stattdessen wird sich der weitere Verlauf der Dissertation der Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Quenchs mithilfe von Variations-Monte-Carlo in Realzeit widmen.

4.8 Variations-Monte-Carlo in Realzeit

Nach der Anwendung zeitabhängiger Störungsrechnung auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell im vorangegangenen Abschnitt befassen sich die folgenden Seiten mit der Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems nach einem Quench mithilfe von Variations-Monte-Carlo in Realzeit (Real-Time Variational Monte Carlo, rt-VMC) befassen. Das Verfahren, welches den Zustand des Systems unter der unitären Zeitentwicklung nach einem Quench im Schrödingerbild durch einen Variationszustand approximiert, geht auf Giuseppe Carleo zurück, der es im Rahmen seiner Dissertation entwickelt hat [224]. Die Zeitabhängigkeit des Variationszustandes steckt ausschließlich in den Variationsparametern. Diese müssen die für die Zeitentwicklung des Systems wichtigen Anregungen oberhalb des Grundzustandes erfassen. Ihre Bewegungsgleichungen werden aus der Bedingung zur Minimierung des euklidischen Abstand zwischen der durch die Schrödingergleichung durch Anwendung des Hamiltonoperators auf den Variationszustand gegebenen exakten Zeitentwicklung und der durch Bildung der zeitlichen Ableitung des Variationszustandes bestimmten Variationszeitentwicklung bestimmt. Nach Lösen der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter kann der Variationszustand durch numerische Integration um einen Zeitschritt propagiert werden und das Verfahren wird wiederholt. Durch eine geeignete Wahl des Variationszustandes kann die Zeitentwicklung des Systems und seiner Observablen bereits mit einer Anzahl an Variationsparametern, die bedeutend kleiner als die Dimensionalität des Hilbertraumes des Systems ist, mit hoher Genauigkeit beschrieben werden.

Ursprünglich wurde Variations-Monte-Carlo in Realzeit von Carleo für das Bose-Hubbard-Modell entwickelt [224]. Für dieses wurden in ein und in zwei Dimensionen durch Carleo *et al.* in [98] die Zeitentwicklung und das Auftreten von Thermalisierung untersucht sowie in [99] die Ausbreitung der Störung nach einem Quench. In der Folgezeit fand das Verfahren weitere Anwendung durch Cevolani *et al.* zur Beschreibung des Relaxationsprozesses des eindimensionalen Bose-Hubbard-Modells mit langreichweitiger Wechselwirkung sowie des eindimensionalen transversalen Ising-Modells mit langreichweitiger Wechselwirkung in [58, 60] sowie durch Ido *et al.* zur Beschreibung stark wechselwirkender elektronischer Systeme in [243]. Die im Folgenden beschriebene Anwendung des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell wurde durch den Autor der vorliegenden Dissertation bereits in [61] veröffentlicht. Nach einer allgemeinen Erläuterung der Grundlagen von Variations-Monte-Carlo in Realzeit wird die konkrete Anwendung des Verfahrens auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenches beschrieben. Hierbei wird sowohl auf die Ansatzfunktionen als auch auf die Herleitung der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter eingegangen und die Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen beschrieben. Die Untersuchung der Zeitentwicklung des Systems nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenches erfolgt für die Systemgrößen 4×4 , 8×8 , 12×12 sowie 16×16 . Die betrachteten Quenchprotokolle für die Wechselwirkungsquenches $(0, h) \rightarrow (J, h)$ und Feldquenches $(J, 0) \rightarrow (J, h)$ lauten

Wechselwirkungsquenches

$$\begin{aligned} (0, 10) &\rightarrow (1, 10) \\ (0, 7.5) &\rightarrow (1, 7.5) \\ (0, 5) &\rightarrow (1, 5) \\ (0, 4) &\rightarrow (1, 4) \\ (0, 3.5) &\rightarrow (1, 3.5) \end{aligned}$$

Feldquenches

$$(1, 0) \rightarrow \begin{cases} (1, 0.25) \\ (1, 0.5) \\ (1, 0.75) \\ (1, 1) \\ (1, 1.25) \end{cases}$$

Als Observablen werden der renormierte Betrag der Magnetisierung sowie die gleichzeitige Korrelationsfunktionen jeweils zweier Spins betrachtet. Im Anschluss an die Beschreibung der Anwendung des Algorithmus auf das System nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenches werden die mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Algorithmus gewonnenen Resultate diskutiert und das System nach den Quenches auf das Auftreten von Thermalisierung untersucht. Zu diesem Zweck werden die zeitgemittelten Erwartungswerte sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit denjenigen des Systems im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur verglichen. Ein anschließendes Finite-Size-Scaling gestattet Rückschlüsse auf das Verhalten des Systems im thermodynamischen Limes und erlaubt so einen Vergleich zu den Vorhersagen des Theorems von Doyon aus [185] zum Auftreten verallgemeinerter Thermalisierung in quantenmechanischen Systemen. Abschließend wird nach den Feldquenches noch das Auftreten von Thermalisierung in Subsystemen untersucht.

4.8.1 Wechselwirkungsquenchs

Für die Wechselwirkungsquenchs wurde ausgehend von den energetischen Betrachtungen zur Bestimmung der effektiven Temperatur nach dem Quench gezeigt, dass das System durch das beschriebene Quenchprotokoll nicht von der paramagnetischen in die ferromagnetische Phase überführt werden kann, sondern innerhalb der paramagnetischen Phase verbleibt. Es wird sich aus diesem Grund durch den Quench keine langreichweitige Ordnung der Spins einstellen. Die Korrelationen zwischen den Spins zeigen in der paramagnetischen Phase einen schnellen exponentiellen Abfall hin zu null, sodass die Spins bereits für kurze Distanzen nicht mehr korreliert sind. Um eine möglichst exakte Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zu ermöglichen, müssen somit die Korrelationsfunktionen zwischen allen Spins des Systems konkret berücksichtigt werden. Dies erfolgt durch Verwendung des *Jastrowansatzes* [174] für die Variationswellenfunktion, der in seiner allgemeinen Form

$$|\Psi(t)\rangle \equiv |\Psi(\boldsymbol{\alpha}(t))\rangle = e^{\phi(t)} \exp \left\{ \sum_k \alpha_k(t) \hat{O}_k \right\} |\Phi\rangle \quad (4.88)$$

lautet. Hierbei ist $\phi(t)$ eine Phase, die $\alpha_k(t)$ sind die zeitabhängigen Variationsparameter, \hat{O}_k sind Anregungsoperatoren, die die für die Zeitentwicklung relevanten Anregungen des Systems oberhalb seines Grundzustandes beschreiben, und $|\Phi\rangle$ ist der zeitunabhängige Zustand, der Lösung des Problems ohne Wechselwirkung ist. Der Jastrowansatz konstruiert somit die Wellenfunktion des Systems ausgehend von einem unkorrelierten Zustand und berücksichtigt die Korrelationen durch den Jastrowfaktor.

Allgemeine Betrachtungen

Bevor die konkrete Anwendung des Jastrowansatzes auf das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen beschrieben wird, soll nun auf die Herleitung der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter eingegangen werden. Diese basiert wiederum auf Referenz [224]. Dabei ist zu beachten, dass die Variationsparameter unter der Zeitentwicklung im Allgemeinen komplexwertig sein werden. Wie Gleichung (4.88) zu entnehmen ist, wird in dem angewendeten Verfahren zur Beschreibung der Nichtgleichgewichtsdynamik des Systems die Zeitabhängigkeit ausschließlich den Variationsparametern zugeschrieben. Zur Herleitung ihrer Bewegungsgleichungen sowie der der Phase wird zum einen die exakt in der Zeit propagierte Wellenfunktion und zum anderen die sich aus dem Variationsprinzip ergebende Zeitentwicklung der Wellenfunktion betrachtet. Die Überlegungen erfolgen in einer Basis $\{|\xi\rangle\}$, in der die Operatoren \hat{O}_k diagonal sind. Dann ergibt sich für die Entwicklungskoeffizienten von $|\Psi(t)\rangle$ aus (4.88)

$$\Psi(\xi, t) := \langle \xi | \Psi(t) \rangle = e^{\phi(t)} \exp \left\{ \sum_k \alpha_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) \right\} \langle \xi | \Phi \rangle \quad (4.89)$$

mit

$$\mathcal{O}_k(\xi) := \langle \xi | \hat{O}_k | \xi \rangle . \quad (4.90)$$

Unter exakter Zeitentwicklung ist die Zeitentwicklung des Systems gemäß der Schrödingergleichung zu verstehen, die sich durch Anwendung des Hamiltonoperators auf den Variationszustand zu einem gegebenen Zeitpunkt ergibt. Es ist

$$|\dot{\Psi}_{\text{exakt}}(t)\rangle = -i\hat{H} |\Psi(t)\rangle . \quad (4.91)$$

Mit der lokalen Energie von $|\xi\rangle$ zum Zeitpunkt t

$$E_{\text{lokal}}(\xi, t) := \frac{\langle \xi | \hat{H} | \Psi(t) \rangle}{\langle \xi | \Psi(t) \rangle} = \sum_{\xi_1} \frac{\langle \xi_1 | \Psi(t) \rangle}{\langle \xi_1 | \Psi(t) \rangle} \langle \xi | \hat{H} | \xi_1 \rangle \quad (4.92)$$

ergibt sich dann für die Projektion der exakten Zeitentwicklung auf den Basiszustand $|\xi\rangle$

$$\dot{\Psi}_{\text{exakt}}(\xi, t) = -iE_{\text{lokal}}(\xi, t)\Psi(\xi, t) . \quad (4.93)$$

Somit ist unter exakter Zeitentwicklung der Zustand zum Zeitpunkt $t' = t + \varepsilon$ in erster Ordnung gegeben durch

$$\Psi_{\text{exakt}}(\xi, t + \varepsilon) = \left[1 - i\varepsilon E_{\text{lokal}}(\xi, t) \right] \Psi(\xi, t) . \quad (4.94)$$

Die Variationszeitentwicklung des Zustandes des Systems zu einem Zeitpunkt t wird durch Bildung der Ableitung des Variationszustandes nach der Zeit bestimmt. Es ergibt sich

$$|\dot{\Psi}_{\text{var}}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \left[\dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \hat{\mathcal{O}}_k \right] |\Psi(t)\rangle . \quad (4.95)$$

Da die Operatoren $\hat{\mathcal{O}}_k$ diagonal in der Basis $\{ |\xi\rangle \}$ sind, folgt für die Projektion auf den Basiszustand $|\xi\rangle$

$$\dot{\Psi}_{\text{var}}(\xi, t) = \left[\dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) \right] \Psi(\xi, t) . \quad (4.96)$$

Unter Variationszeitentwicklung folgt somit für den Zustand des Systems zum Zeitpunkt $t' = t + \varepsilon$ in erster Ordnung

$$\Psi_{\text{var}}(\xi, t + \varepsilon) = \left[1 + \varepsilon \left(\dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) \right) \right] \Psi(\xi, t) . \quad (4.97)$$

Die Bewegungsgleichungen der Variationsparameter sind durch die Bedingung bestimmt, dass der euklidische Abstand

$$\mathcal{D}(t) = \sqrt{\sum_{\xi} |\Psi_{\text{exakt}}(\xi, t + \varepsilon) - \Psi_{\text{var}}(\xi, t + \varepsilon)|^2} \quad (4.98)$$

zwischen der exakt sowie der gemäß dem Variationsprinzip in der Zeit propagierten Wellenfunktion minimal wird. Einsetzen von (4.94) und (4.97) in diesen Ausdruck für $\mathcal{D}(t)$ führt zu

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(t) &= \sqrt{\sum_{\xi} |\dot{\Psi}_{\text{exakt}}(\xi, t) - \dot{\Psi}_{\text{var}}(\xi, t)|^2} \\ &= \sqrt{\sum_{\xi} \left(|\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left| \dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) + \imath E_{\text{lokal}}(\xi, t) \right|^2 \right)} . \end{aligned} \quad (4.99)$$

Die in Anhang A beschriebene Minimierung dieses Ausdrucks führt zu den Bewegungsgleichungen der Variationsparameter und der Phase gemäß [98]

$$\sum_{k'} \langle \delta \hat{\mathcal{O}}_k \delta \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle \dot{\alpha}_{k'}(t) = -\imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \delta \hat{\mathcal{O}}_k \rangle , \quad (4.100a)$$

$$\dot{\phi}(t) = -\imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \rangle - \sum_k \langle \hat{\mathcal{O}}_k \rangle \dot{\alpha}_k(t) . \quad (4.100b)$$

Die auftretenden Erwartungswerte für einen beliebigen Operator $\hat{\mathcal{O}}$ sind definiert gemäß

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \mathcal{O}(\xi)}{\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2} \quad (4.101)$$

und es ist

$$\delta \hat{\mathcal{O}} := \hat{\mathcal{O}} - \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle . \quad (4.102)$$

Die Koeffizienten der Bewegungsgleichung sind zeitabhängige Erwartungswerte von Operatoren und können im Allgemeinen nicht analytisch bestimmt werden. Zu ihrer Bestimmung werden beispielsweise Quanten-Monte-Carlo-Verfahren verwendet. Ein konkretes Vorgehen wird im Folgenden für das transversale Ising-Modell beschrieben werden. Die zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung der Basiszustände $|\xi\rangle$ zum Zeitpunkt t wird durch die Variationsparameter $\alpha_k(t)$ bestimmt. Die Phase $\phi(t)$ beeinflusst die Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht. Weiterhin zeigt sich, dass die Zeitentwicklung der Variationsparameter unabhängig von der Phase ist. Da die Phase für die Berechnung von Erwartungswerten unerheblich ist, wird sie bei den konkreten Betrachtungen zur Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Wechselwirkungsquenchs infolgedessen vernachlässigt werden. Nach Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen werden diese numerisch aufintegriert und das System dadurch um einen Zeitschritt propagiert. Durch die Bewegungsgleichungen (4.100a) und (4.100b) ist die Dynamik des Systems vollständig bestimmt. Wie in [224] gezeigt wurde, sind sowohl die Norm des Variationszustandes als auch die Energie des Systems unter der Zeitentwicklung erhalten.

Anwendung auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell

Nach den allgemeinen Betrachtungen zur Zeitentwicklung der Variationsparameter bei Verwendung des Jastrowansatzes für die Variationswellenfunktion soll nun auf die konkrete Anwendung des Ansatzes auf das transversale Ising-Modell eingegangen werden. Im Begleitmaterial von [58] wurde der Jastrowansatz für das transversale Ising-Modell in einer Dimension beschrieben. Das Vorgehen kann unmittelbar auf das Modell in zwei Dimensionen übertragen werden. Es wird die Jastrow-Feenberg-Korrelationsentwicklung verwendet. In dieser erfolgt die Entwicklung in Termen der lokalen Spinoperatoren in x -Richtung. Aufgrund der Homogenität und Translationsinvarianz des Systems verschwinden hierbei Terme, die nur eine Position des Gitters betreffen. Unter Beschränkung auf die Betrachtung der Korrelationen jeweils zweier Spins ergibt sich somit folgende Ansatzfunktion für das zweidimensionale transversale Ising-Modell nach den Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen Phase

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}(t) \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \right\} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z . \quad (4.103)$$

Eine möglich Phase wird hierbei vernachlässigt, da sie, wie bereits während der allgemeinen Betrachtungen erläutert wurde, nicht in den Bewegungsgleichungen der Variationsparameter auftritt und auch bei der Berechnung von Erwartungswerten nicht berücksichtigt werden muss. Die Operatoren $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ sind die Korrelationsfunktionen zweier Spins im Abstand \mathbf{r} gemäß (4.11)

$$\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} = \frac{1}{N_{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^x . \quad (4.104)$$

Die Summation über \mathbf{r} läuft über alle unabhängigen Richtungen auf dem Gitter. Für jede unabhängige Richtung \mathbf{r} erfolgt eine Mittelung über alle zugehörigen Spinpaare. Diese Mittelung schließt auch alle Spinpaare zu allen abhängigen Richtungen zu \mathbf{r} mit ein. Die Anzahl der unabhängigen Richtungen \mathbf{r} auf einem Quadratgitter der Kantenlänge L mit $N = L^2$ Positionen ist gegeben durch $\frac{N}{8} + \frac{3L}{4}$. Sie entspricht gerade der Anzahl der Variationsparameter, die somit in führender Ordnung linear mit der Systemgröße wächst im Gegensatz zur Dimensionalität des Hilbertraumes, die exponentiell mit der Systemgröße zunimmt. $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z$ ist der vollkommen unkorrelierte Zustand des Systems in Bezug auf Messung der Korrelationen in x -Richtung. Dies zeigt sich anhand seiner Darstellung in der \mathbf{x} -Basis, bei der es sich um die symmetrische Überlagerung aller Basiszustände handelt

$$|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle . \quad (4.105)$$

Die Korrelationen zwischen den Spins werden durch den Jastrowfaktor

$$\exp \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}(t) \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \right\} \quad (4.106)$$

berücksichtigt. Die weiteren Betrachtungen erfolgen in der \mathbf{x} -Basis. In dieser sind die die Korrelationen der Spins innerhalb des Systems beschreibenden Operatoren $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ diagonal und das Skalarprodukt eines jeden Basiszustandes mit dem unkorrelierten Zustand ist nach (4.105) unmittelbar bekannt mit dem Wert $1/\sqrt{2^N}$. Die Entwicklungskoeffizienten der Ansatzfunktion (4.103) für die Wellenfunktion des Systems nach den Wechselwirkungsquenchs in der \mathbf{x} -Basis lauten somit

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \exp \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}(t) C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}) \right\} \quad (4.107)$$

mit

$$C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}) := \langle \mathbf{x} | \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} | \mathbf{x} \rangle . \quad (4.108)$$

Die Bewegungsgleichungen der Variationsparameter ergeben sich unmittelbar aus (4.100a) zu

$$\sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \delta \hat{C}_{\mathbf{r}'}^{xx} \rangle \dot{\alpha}_{\mathbf{r}'}(t) = -i \langle E_{\text{lokal}}(t) \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle . \quad (4.109)$$

Die auftretenden Erwartungswerte werden mithilfe eines Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus bestimmt [244]. Dieser ermittelt die Korrelationen zwischen allen Spinpaaren des Systems. Die Erzeugung der Konfigurationen, die die Stichproben für den Monte-Carlo-Mittelwert darstellen, erfolgt dadurch, dass ausgehend von der aktuellen Konfiguration der Umklapp eines einzelnen Spins vorgeschlagen und mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit akzeptiert wird. Auf den Algorithmus wird in Anhang B detailliert eingegangen. Die Beschreibung umfasst unter anderem die Herleitung der Akzeptanzwahrscheinlichkeiten sowie eine Überprüfung der Konvergenz des Algorithmus.

Nach Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen wird das Gleichungssystem nach den $\dot{\alpha}_{\mathbf{r}}(t)$ aufgelöst und durch numerische Integration mit einem Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung gelöst. Hierzu wird die Routine *rk4.cpp* aus den Numerical Recipes in C++ [219] verwendet. Das System wird auf diese Weise ausgehend von seinem Zustand zu einem gegebenen Zeitpunkt um einen kleinen Zeitschritt in der Zeit propagiert. Im Rahmen der Diskussion des Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus in Anhang B wird ebenfalls auf die Größe der Zeitschritte eingegangen.

Zur Bestimmung der Zeitentwicklung des Systems nach den Wechselwirkungsquenchs verbleibt somit noch die Bestimmung der Anfangswerte der Variationsparameter. Für die betrachteten Wechselwirkungsquenchs mit $J_0 = 0$ können diese direkt angegeben werden, da der Anfangszustand gerade dem vollständig unkorrelierten Zustand entspricht. Der Jastrowfaktor muss somit den Wert 1 annehmen. Dies ist der Fall für

$$\alpha_{\mathbf{r}}(0) = 0 \quad \forall \mathbf{r} . \quad (4.110)$$

Auch wenn bei der Betrachtung der Wechselwirkungsquenchs im zweidimensionalen transversalen Ising-Modells immer vom vollständig unkorrelierten Zustand (4.105) ausgegangen wird, soll in Anhang C dennoch erläutert werden, wie die Anfangswerte der Variationsparameter für $J_0 \neq 0$ effizient bestimmt werden können. Das hierzu verwendete Verfahren basiert auf einem Algorithmus von Sorella aus [245], mit dessen Hilfe auch die Grundzustandsenergie und -magnetisierung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells für einen weiten Parameterbereich von h/J bestimmt werden können.

Bestimmung der Observablen

Die Bestimmung der Korrelationsfunktionen erfolgt für alle unabhängigen Richtungen auf dem Gitter während der Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter $\alpha_{\mathbf{r}}(t)$ als ein Monte-Carlo-Mittelwert. Der Betrag der Magnetisierung wird als Monte-Carlo-Mittelwert über die gleichen Konfigurationen bestimmt. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen von ε_n^{xx} und μ_m^x ergeben sich ebenfalls unmittelbar aus dem Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus.

Überprüfung des Algorithmus

In dem beschriebenen Algorithmus zur Bestimmung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Wechselwirkungsquenchs gibt es drei Parameter, die seine Effizienz und Konvergenz beeinflussen. Bei diesen handelt es sich um die Anzahl M der Stichproben, über die die Monte-Carlo-Mittelwerte für die Observablen und die Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter gebildet werden, die Anzahl m_s der Monte-Carlo-Schritte zwischen zwei Messungen bei der Bildung der Monte-Carlo-Mittelwerte sowie die Schrittweite δt der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen mithilfe des Runge-Kutta-Verfahrens. Unter einer Messung ist hierbei die Berücksichtigung der Konfiguration bei der Bestimmung des Monte-Carlo-Mittelwertes zu verstehen. Die beiden erstgenannten Parameter gehören zu dem in Anhang B beschriebenen Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus. Der Fehler der Monte-Carlo-Mittelwerte ist umgekehrt proportional zu der Wurzel der Stichproben, über die die Mittelung erfolgt. Hierfür ist von Bedeutung, dass die erzeugten Stichproben unabhängig voneinander sind. Um dies zu gewährleisten, darf bei dem Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus nicht jede erzeugte Konfiguration bei der Bestimmung des Monte-Carlo-Mittelwertes verwendet werden, sondern zwei Messungen müssen durch eine gewisse Anzahl an Monte-Carlo-Schritten getrennt sein. Die Schrittweite δt schließlich beeinflusst die Konvergenz des Runge-Kutta-Verfahrens. Die Effizienz des Algorithmus ist umso höher, je kleiner M und m_s und je größer δt ist. Werden M und m_s jedoch zu klein bzw. δt zu groß gewählt, so verschlechtert sich die Konvergenz des Algorithmus. Hierbei ist zwischen der Konvergenz des Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus und der Konvergenz des Runge-Kutta-Verfahrens zu unterscheiden.

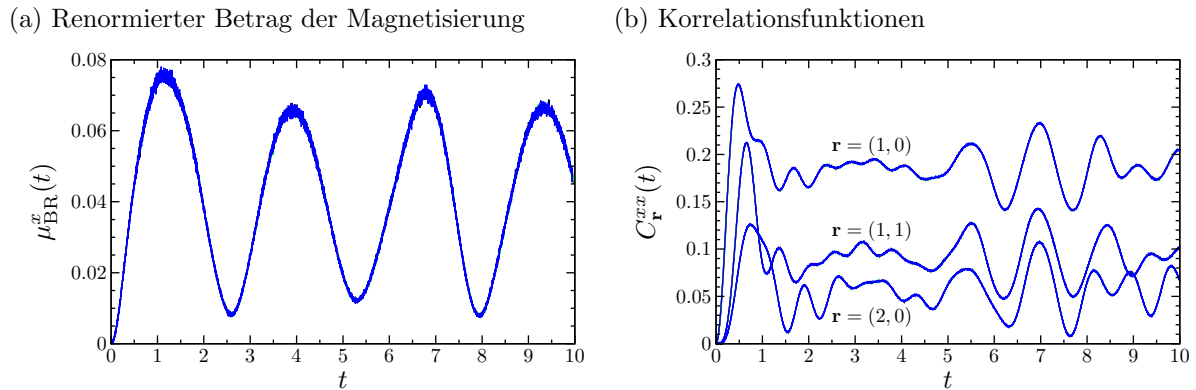


Abbildung 4.15: Zeitentwicklung (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der Korrelationsfunktionen mit $\mathbf{r} = (1,0)$, $\mathbf{r} = (1,1)$ und $\mathbf{r} = (2,0)$ bestimmt mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Algorithmus mit der Ansatzfunktion (4.103) für das System der Größe 16×16 nach dem Wechselwirkungsquench $(0,3.5) \rightarrow (1,3.5)$. Für die Parameter M , m_S und δt wurden dabei folgende Werte gewählt: — ($M = 20000$, $m_S = 2N$, $\delta t = 0.01$), — ($M = 40000$, $m_S = 2N$, $\delta t = 0.01$), — ($M = 20000$, $m_S = 4N$, $\delta t = 0.01$), — ($M = 20000$, $m_S = 2N$, $\delta t = 0.001$). Die Kurven für die verschiedenen Parametersätze fallen überein, d. h. das Verfahren konvergiert bereits für ($M = 20000$, $m_S = 2N$, $\delta t = 0.01$).

Um geeignete Werte für die Parameter M , m_S und δt zu finden, werden ausgehend von einem Satz Parameter M und m_S vergrößert und δt verkleinert, bis sich die erzeugten Resultate nicht mehr ändern und der Algorithmus somit konvergiert ist. Hierzu wird das Quenchprotokoll betrachtet, welches die höchsten Ansprüche an die Numerik stellt. Bei diesem handelt es sich um den Wechselwirkungsquench $(0,3.5) \rightarrow (1,3.5)$ im 16×16 -System, welcher den stärksten betrachteten Wechselwirkungsquench im größten betrachteten System darstellt. Konvergiert der Algorithmus für diesen Quench, so ist die Konvergenz auch für die anderen Quenches gegeben. Als geeigneter Satz der Parameter M , m_S und δt hat sich $M = 20000$, $m_S = 2N$ und $\delta t = 0.01$ erwiesen. Zum Nachweis der Konvergenz des Algorithmus für diese Parameter wurden M bzw. m_S verdoppelt bzw. $\delta t = 0.01$ auf ein Zehntel reduziert. Wie der Darstellung des zeitlichen Verlaufs des Betrages der Magnetisierung und der Korrelationsfunktion zwischen Spins in verschiedenen Abständen zueinander in Abbildung 4.15 entnommen werden kann, beeinflussen die beschriebenen Änderungen der Parameter die Resultate für die Zeitentwicklung der Observablen nicht. Die Laufzeit des Verfahrens, um das 16×16 -System bei den gewählten Parametern $M = 20000$, $m_S = 2N$ und $\delta t = 0.01$ um einen Zeitschritt zu propagieren, beträgt auf einem Kern eines Intel Xeon E5-2680 v2, der auf 2,8 GHz taktet, ungefähr 400s. Es gilt zu beachten, dass obige Überlegungen lediglich zeigen, dass der Algorithmus für die gewählten Parameter konvergiert, d. h. unter Verwendung der beschriebenen Ansatzfunktion und der sich daraus ergebenden Einschränkungen in Bezug auf die Gestalt der Wellenfunktion die Zeitentwicklung korrekt beschreibt. Sie zeigen hingegen nicht, dass die Ergebnisse des Variations-Monte-Carlo-Algorithmus mit der exakten Zeitentwicklung des Systems nach den Wechselwirkungsquench übereinstimmen. Die Güte der Beschreibung der Zeitentwicklung hängt im Falle der Konvergenz des Algorithmus somit nicht von dem Algorithmus selbst ab, sondern davon, wie gut die Variationswellenfunktion die Wellenfunktion des Systems nach den Wechselwirkungsquench approximiert. Zur Abschätzung der Güte der Beschreibung der Zeitentwicklung in Abhängigkeit von dem betrachteten Quenchprotokoll werden in den Abbildungen 4.16 und 4.17 die Ergebnisse des Variations-Monte-Carlo-Algorithmus für das 4×4 -System mit exakten Resultaten verglichen, die durch numerische Integration der Schrödingergleichung bestimmt wurden. Verglichen werden der zeitliche Verlauf des renormierten Betrages der Magnetisierung in Abbildung 4.16 sowie der zeitliche Verlauf der Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn in Abbildung 4.17. Der Zeitmittelwert der Observablen ist in den Graphen eingezeichnet. Weiterhin werden die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Observablen für das mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Algorithmus sowie das mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung in der Zeit propagierte Systems verglichen. Zur Abschätzung der Verhältnisse h/J , für die das Variations-Monte-Carlo-Verfahren unter Verwendung des Jastrowansatzes zur Beschreibung des Relaxationsprozesses des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den

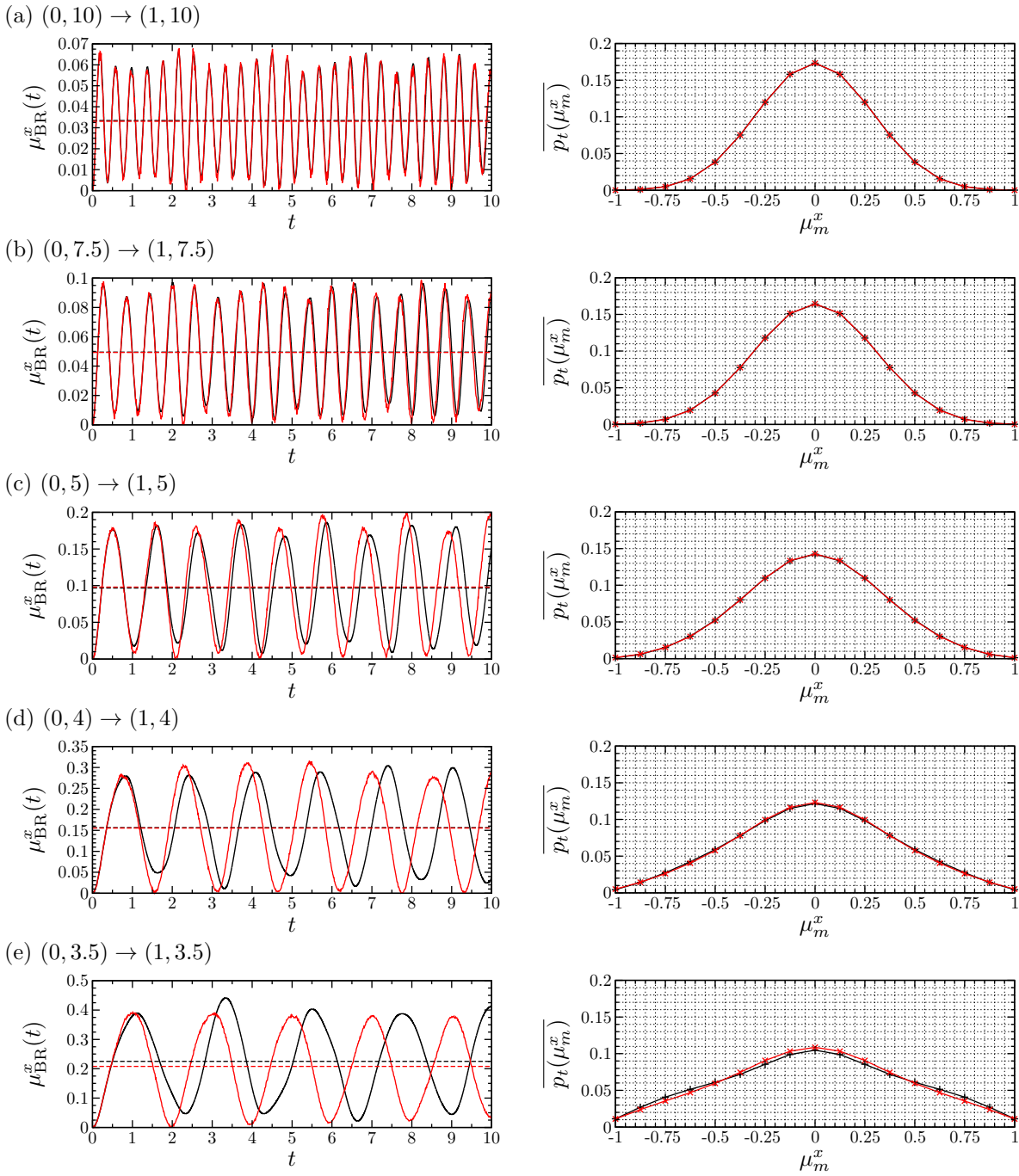


Abbildung 4.16: (a)-(e) Vergleich zwischen mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung bestimmten Resultaten (—) für die Magnetisierung des Systems und Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes (—) nach Wechselwirkungsquenchs. Die Graphen in der linken Spalte stellen den zeitlichen Verlauf des renormierten Betrages der Magnetisierung dar. Die gestrichelten Linien sind die Zeitmittel der entsprechenden Kurven. Die Graphen der rechten Spalte zeigen die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Werte von μ_m^x . Die Zeitmittel wurden jeweils über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Bei Betrachtung der Zeitentwicklung zeigen sich Abweichungen in Bezug auf die Amplitude und Frequenz der auftretenden Oszillationen. Diese Abweichungen treten zu umso früheren Zeiten auf, je stärker der Quench ist, d. h. je kleiner \hbar/J nach dem Quench und je näher das System somit dem Phasenübergang ist. Die zeitlichen Mittelwerte des Betrages der Magnetisierung sowie die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x hingegen zeigen abgesehen von dem Quench $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ eine gute Übereinstimmung.

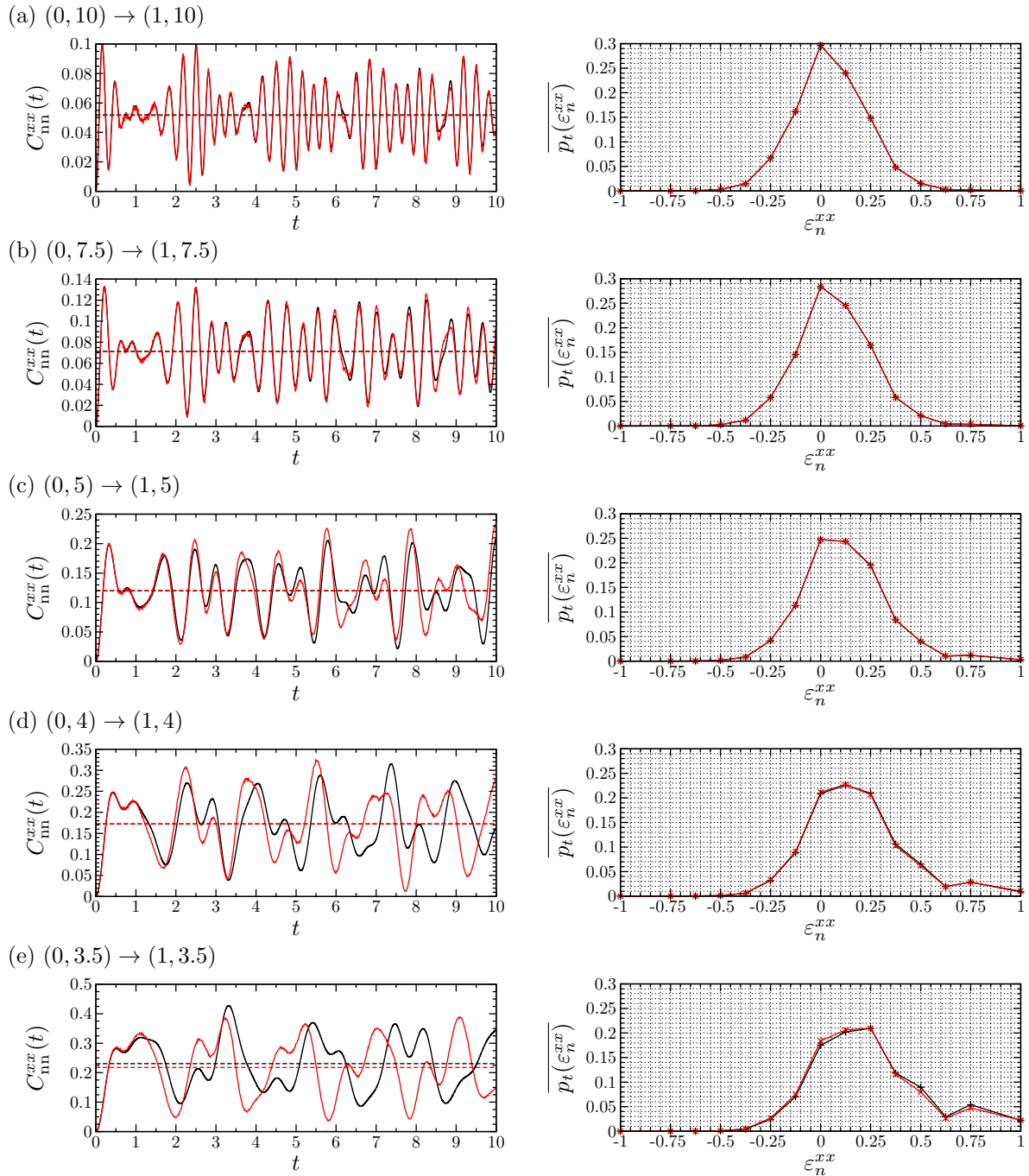
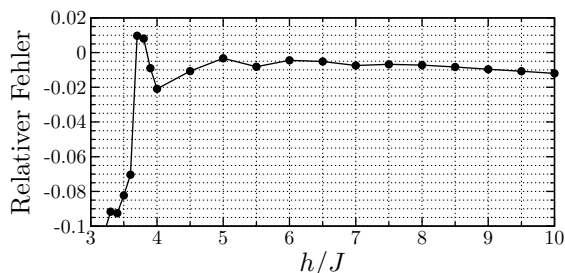
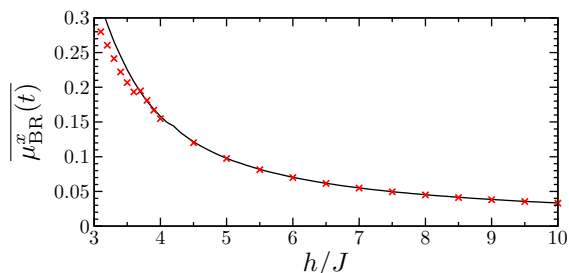


Abbildung 4.17: (a) - (e) Vergleich zwischen mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung bestimmten Resultaten (—) für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn und Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes (—) nach Wechselwirkungsquenchs. Die Graphen in der linken Spalte stellen den zeitlichen Verlauf der Korrelationsfunktion dar. Die gestrichelten Linien sind die Zeitmittel der entsprechenden Kurven. Die Graphen der rechten Spalte zeigen die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Werte von ε_n^{xx} . Die Zeitmittel wurden jeweils über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Bei Betrachtung der Zeitentwicklung zeigen sich Abweichungen in Bezug auf die Amplitude und Frequenz der auftretenden Oszillationen. Diese Abweichungen treten zu umso früheren Zeiten auf, je stärker der Quench ist, d. h. je kleiner h/J nach dem Quench und je näher das System somit dem Phasenübergang ist. Die zeitlichen Mittelwerte der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn sowie die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der ε_n^{xx} hingegen zeigen abgesehen von dem Quench $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ eine gute Übereinstimmung.

(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung



(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

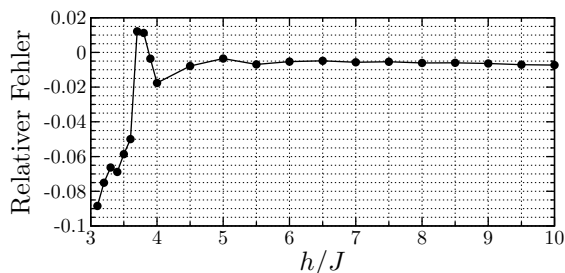
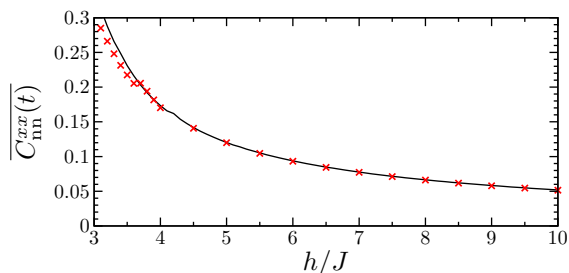
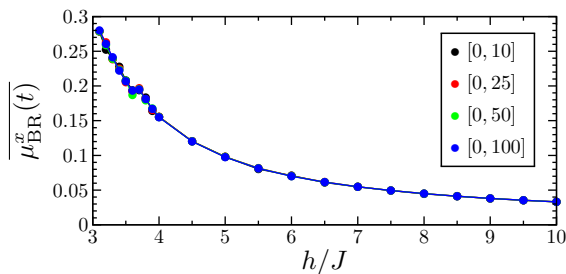


Abbildung 4.18: Vergleich der Zeitmittelwerte (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn für das 4×4 -System nach den Wechselwirkungsquenchs bestimmt mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung (—) und mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes (\times). Zusätzlich ist der relative Fehler der Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens aufgetragen. Es zeigt sich, dass der relative Fehler für $h/J \geq 4.5$ in guter Näherung konstant ist und weniger als 1% beträgt. Für kleinere Verhältnisse h/J wächst der Fehler schnell an.

Wechselwirkungsquenchs geeignet ist, werden die Quenchprotokolle $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ und $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ betrachtet. Die Zeitentwicklung des Systems erfolgt für beide Observablen sowohl mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens als auch mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung für Zeiten bis hin zu $t = 100$. Das Zeitmittel wird über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. In den Graphen ist zwecks besserer Ablesbarkeit lediglich das Zeitintervall $[0, 10]$ dargestellt. Ein Vergleich des Verlaufs der Kurven zeigt, dass das Variations-Monte-Carlo-Verfahren unter Verwendung des Jastrowansatzes (4.103) umso besser zur Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells geeignet ist, je größer das Verhältnis h/J ist. Nähert sich das System dem Phasenübergang, d. h. nähert sich das Verhältnis h/J nach dem Quench dem Wert $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$, so zeigen sich Abweichungen zwischen der Zeitentwicklung mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens und der exakten Zeitentwicklung. Diese Abweichungen betreffen sowohl die Amplitude als auch die Frequenz der auftretenden Oszillationen in der Zeitentwicklung der Observablen. Je kleiner das Verhältnis h/J ist, zu umso früheren Zeiten treten diese Abweichungen in Erscheinung. Die zeitlichen Mittelwerte sowohl der Observablen als auch der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren hingegen werden gut reproduziert. Für diese sind ab $h/J = 4$ Abweichungen zu beobachten, die mit kleiner werdendem Verhältnis h/J zunehmen. Zur Quantifizierung der Abweichungen ist in Abbildung 4.18 der Verlauf der Zeitmittelwerte für das mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zeitentwickelte System sowie das mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung exakt in der Zeit propagierte System in Abhängigkeit von h/J sowie der relative Fehler der Ergebnisse des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens dargestellt. Aus der Abbildung kann entnommen werden, dass der relative Fehler der Zeitmittelwerte des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens bis $h/J \geq 4.5$ stabil bleibt und bei weniger als 1% liegt. Für kleinere Verhältnisse h/J hingegen wächst der Fehler stark an. Bei den in der Abbildung dargestellten Werten handelt es sich um Zeitmittel über das Zeitintervall $[0, 100]$. Die Bildung des Zeitmittels erweist sich hierbei als stabil gegenüber Änderung des Zeitintervalls, über das die Mittelung erfolgt, und es zeigt sich, dass sich bereits bei Mittelung über erheblich kürzere Zeitintervalle in guter Näherung die gleichen Zeitmittelwerte ergeben. Dies ist in Abbil-

(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung



(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

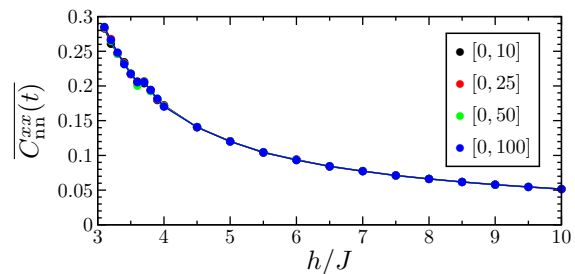


Abbildung 4.19: Einfluss der Länge des Zeitintervalls, über das das Zeitmittel gebildet wird, auf den Zeitmittelwert (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn für das 4×4 -System nach den Wechselwirkungsquenchs. Betrachtet werden die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes. Es zeigt sich, dass die Zeitmittelwerte bereits für das kurze Zeitintervall $[0, 10]$ einen Wert erreicht haben, der stabil gegenüber einer weiteren Verlängerung des Zeitintervalls ist.

dung 4.19 veranschaulicht. Die Mittelung erfolgt über die Zeitintervalle $[0, 10]$, $[0, 25]$, $[0, 50]$ und $[0, 100]$. Betrachtet werden dabei die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens. Ein Vergleich der Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zu exakten Resultaten ist nur für das 4×4 -System möglich. Da jedoch die Korrelationen zwischen Spins zu allen unabhängigen Richtungen auf dem Gitter durch den Jastrowansatz explizit berücksichtigt werden, ist zu erwarten, dass der für das 4×4 -System beobachtete Grad der Übereinstimmung zwischen den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens und der exakten Resultate auch für größere Systemgrößen erhalten bleibt. Da zur Beantwortung der Frage, ob das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen nach Quenchs thermalisiert, Zeitmittel der Observablen mit den thermischen Erwartungswerten verglichen werden, ist das Variations-Monte-Carlo-Verfahren unter Verwendung des Jastrowansatzes aufgrund der guten Übereinstimmung der Zeitmittel zu den Zeitmitteln der exakten Zeitentwicklung für die Untersuchung zum Auftreten von Thermalisierung geeignet. Die Diskussion der Resultate für alle mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens betrachteten Systemgrößen sowie ein Vergleich zum System im thermischen Gleichgewicht erfolgt gemeinsam mit den Resultaten für die Feldquenchs in einem späteren Kapitel. Zunächst werde sich jedoch den Feldquenchs zugewandt.

4.8.2 Feldquenchs

Die Betrachtungen zu den Wechselwirkungsquenchs haben gezeigt, dass die Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes umso exakter ist, je größer das Verhältnis h/J nach dem Quench ist. Für die Feldquenchs, die bei $h_0/J = 0$ starten, wird h/J nach dem Quench derart gewählt, dass $(h/J, T_{\text{eff}}/J)$ mit der dem System nach dem Quench aus den energetischen Betrachtungen zugeordneten effektiven Temperatur T_{eff} noch innerhalb der ferromagnetischen Phase liegt. In dem Kapitel zur Bestimmung der effektiven Temperatur wurde gezeigt, dass dies für $h/J \approx \frac{1}{2}(h/J)_{\text{crit}}$ der Fall ist. Die betrachteten Verhältnisse von h/J nach den Feldquenchs sind somit bedeutend kleiner als die Verhältnisse von h/J , für die die Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes eine gute Übereinstimmung zu der exakten Zeitentwicklung aufweist. Zudem ergibt sich das Problem, dass der Anfangszustand

$$|\Psi(t = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle_x \right) \quad (4.111)$$

nicht mithilfe des Jastrowansatzes dargestellt werden kann. Aus diesen Gründen ist zur Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Feldquenchs mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens eine neue Ansatzfunktion erforderlich.

Den Ausgangspunkt der Konstruktion der zeitabhängigen Variationswellenfunktion zur Beschreibung des

Systems nach den Feldquenchs bildet die Zeitentwicklung in der Basis der Eigenzustände des Hamiltonoperators nach dem Quench. Bezeichnet E_λ die Energieeigenwerte des Systems nach dem Quench und $|\Psi_\lambda\rangle$ die zugehörigen Eigenzustände des Hamiltonoperators \hat{H} , so kann der Zustand des Systems zum Zeitpunkt $t > 0$ ausgehend von der Schrödingergleichung geschrieben werden als

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi(t=0)\rangle = \sum_{\lambda} e^{-iE_\lambda t} \langle\Psi_\lambda|\Psi(t=0)\rangle |\Psi_\lambda\rangle . \quad (4.112)$$

Die E_λ und $|\Psi_\lambda\rangle$ sind dabei unbekannt, jedoch können aufgrund der Struktur von $|\Psi(t=0)\rangle$ nach (4.111) einige Aussagen getroffen werden. $|\Psi(t=0)\rangle$ ist symmetrisch, d. h. invariant unter einem globalen Spin-Umklapp. Infolgedessen verschwindet das Skalarprodukt $\langle\Psi_\lambda|\Psi(t=0)\rangle$ für alle antisymmetrischen Zustände $|\Psi_\lambda\rangle$. Die Hälfte der Eigenzustände von \hat{H} sind somit für die Zeitentwicklung des Zustandes des Systems unerheblich. Für die symmetrischen Eigenzustände von \hat{H} hingegen ist der Beitrag zur Zeitentwicklung des Systems umso größer, je größer die Entwicklungskoeffizienten der beiden vollständig in x -Richtung magnetisierten Basiszustände in ihrer Darstellung in der \mathbf{x} -Basis sind. Dies ist in Abbildung 4.20 für das 3×3 -System für verschiedene Verhältnisse h/J dargestellt.

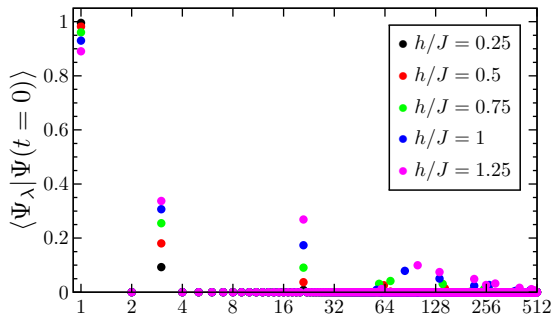


Abbildung 4.20: Überlapp $\langle\Psi_\lambda|\Psi(t=0)\rangle$ zwischen den Eigenzuständen des Hamiltonoperators nach den Feldquenchs und dem Anfangszustand des Systems für verschiedene Verhältnisse h/J . Die Zustände $|\Psi_\lambda\rangle$ sind nach steigender Energie geordnet. Der Überlapp verschwindet für die antisymmetrischen Eigenzustände von \hat{H} und auch für einen großen Anteil der symmetrischen Eigenzustände und fällt mit zunehmender Energie ab.

Wie der Abbildung entnommen werden kann, ist für das 3×3 -System bei kleinen Verhältnissen h/J auch von den symmetrischen Energieeigenzuständen nur ein kleiner Anteil für die Zeitentwicklung des Systems nach einem Feldquenchs von Bedeutung.

Ausgehend von der Darstellung der Zeitentwicklung des Zustandes in der Energieeigenbasis des Systems nach dem Quench in (4.112) soll nun ein Variationsansatz für die zeitabhängige Wellenfunktion des Systems für das Variations-Monte-Carlo-Verfahren nach den Feldquenchs hergeleitet werden. Für $h/J = 0$ sind die Basiszustände der \mathbf{x} -Basis Eigenzustände des Hamiltonoperators. Die Energie eines Basiszustandes wird ausschließlich durch die Anzahl n der Kinks in ihm bestimmt. Hieraus ergeben sich diskrete Energieniveaus des Systems und die Eigenzustände seines Hamiltonoperators zu einer gegebenen Energie beinhalten nur Basiszustände mit der gleichen Kinkzahl. Durch Einschalten des Transversalfeldes ist der Hamiltonoperator nicht mehr diagonal in der \mathbf{x} -Basis. Seine Energiebänder werden wie in Abbildung 4.21 für das 3×3 -System gezeigt aufgebogen und in der Darstellung in der \mathbf{x} -Basis enthält jeder der Energieeigenzustände nicht mehr nur Basiszustände mit der gleichen Anzahl an Kinks.

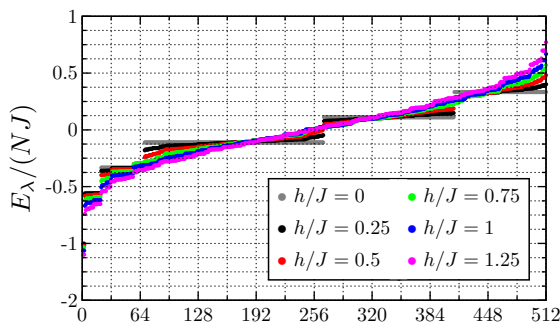


Abbildung 4.21: Verlauf der Eigenwerte E_λ des Hamiltonoperators \hat{H} für das 3×3 -System. Die E_λ sind nach steigender Energie geordnet. Für $h/J = 0$ ergeben sich einzelne Energiebänder, innerhalb derer jeder Eigenzustand von \hat{H} nur Basiszustände der x -Basis mit der gleichen Kinkzahl N enthält. Mit zunehmendem Transversalfeld h/J wird die energetische Entartung aufgehoben und es erfolgt eine Aufbiegung der Energiebänder.

Hierbei sei darauf hingewiesen, dass für Systeme mit ungerader Kantenlänge die Energieeigenwerte im Gegensatz zu Systemen mit gerader Kantenlänge nicht symmetrisch zu null liegen. Dies folgt daraus, dass bei ungerader Kantenlänge einige der in (4.14) angegebenen großen Kinkzahlen nicht angenommen

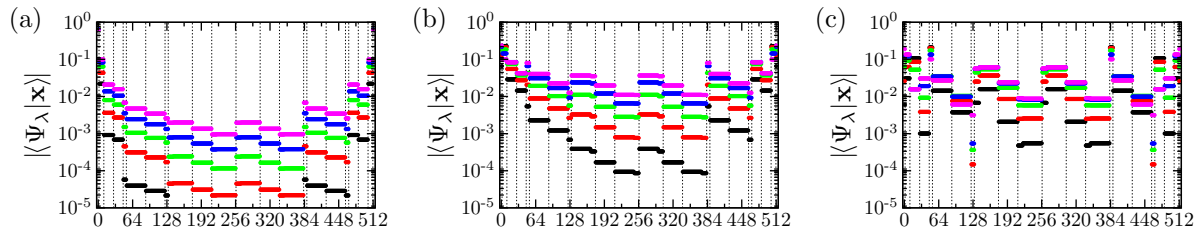


Abbildung 4.22: Betrag der Entwicklungskoeffizienten der drei Eigenzustände von \hat{H} mit dem größten Überlapp mit dem Anfangszustand des Systems für das 3×3 -System (siehe Abbildung 4.20) und verschiedene Verhältnisse h/J in der \mathbf{x} -Basis. Der Farbcode ist \bullet $h/J = 0.25$, \bullet $h/J = 0.5$, \bullet $h/J = 0.75$, \bullet $h/J = 1.0$, \bullet $h/J = 1.25$. Die Basiszustände der \mathbf{x} -Basis sind nach steigendem m (Anzahl Spin down) und n (Anzahl Kinks) angeordnet. Die Entwicklungskoeffizienten für verschiedene (m, n) sind dabei durch gestrichelte Linien voneinander abgegrenzt. Für ein gegebenes (m, n) stimmen die Entwicklungskoeffizienten in guter Näherung überein. Die möglichen Werte von (m, n) können Tabelle 4.1 entnommen werden.

m	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
n	0	4	6, 8	6, 8, 10, 12	8, 10, 12	8, 10, 12	6, 8, 10, 12	6, 8	4	0

Tabelle 4.1: Mögliche Werte von (m, n) für das 3×3 -System.

werden können. Im Falle des 3×3 -Systems sind beispielsweise nur die Kinkzahlen $n = 0, 4, 6, 8, 10$ und 12 möglich. Es existiert somit eine größere Anzahl an negativen als an positiven Energieeigenwerten. Eine genauere Betrachtung der Energieeigenzustände zeigt, dass für kleine Verhältnisse h/J in der Darstellung in der \mathbf{x} -Basis Basiszustände mit der gleichen Anzahl m an Spin down, d. h. der gleichen Magnetisierung, und der gleichen Anzahl n an Kinks, d. h. dem gleichen Energiebeitrag aus dem Diagonalanteil des Hamiltonoperators, in guter Näherung die gleichen Entwicklungskoeffizienten haben. Dies ist in Abbildung 4.22 für das 3×3 -System für die drei Eigenzustände des Hamiltonoperators nach dem Feldquench mit dem größten Überlapp mit dem Anfangszustand für verschiedene Verhältnisse von h/J dargestellt. Diese Beobachtung erlaubt folgende Näherung für die Energieeigenzustände $|\Psi_\lambda\rangle$ nach dem Quench:

$$|\Psi_\lambda\rangle \approx \sum_{m,n} c_{m,n}^\lambda |\Psi_{m,n}\rangle. \quad (4.113)$$

Bei den $c_{m,n}^\lambda$ handelt es sich um Entwicklungskoeffizienten und die Zustände $|\Psi_{m,n}\rangle$ sind die normierten symmetrischen Überlagerungen aller Basiszustände der \mathbf{x} -Basis mit m Spin down und n Kinks:

$$|\Psi_{m,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{m,n}}} \sum_{k=1}^{N_{m,n}} |\Psi_{m,n}^k\rangle. \quad (4.114)$$

Die Summation über k läuft über alle Basiszustände der \mathbf{x} -Basis mit m Spin down und n Kinks, deren Anzahl mit $N_{m,n}$ bezeichnet werde. Die Güte der gemachten Näherung hängt vom Verhältnis h/J ab. Während sie für $h/J = 0$ exakt ist, verschlechtert sich die Approximation mit zunehmendem h/J . Aus diesem Grund wird sie im Folgenden nur auf Feldquenches angewendet, die im vollständig magnetisierten Zustand starten und die ferromagnetische Phase nicht verlassen. Weiterhin sind die im System vorhandenen Symmetrien für die Güte der Näherung von Bedeutung. Eng verknüpft hiermit ist die räumliche Dimensionalität d des Systems. Die Zuordnung desselben zeitabhängigen Variationsparameters zu zwei Basiszuständen ist genau dann exakt, wenn sie durch Symmetrietransformationen ineinander überführt werden können. Hierzu gehören Translationen, Rotationen sowie Spiegelungen. Je höher die Dimensionalität des Systems ist, desto größer ist die Anzahl an Symmetrien. Es werde beispielsweise ein Zustand mit zwei Spin down in einem System aus N Spins betrachtet, die übernächste Nachbarn zueinander sind. Im eindimensionalen System mit periodischen Randbedingungen besteht lediglich eine Translationsymmetrie. Hieraus ergeben sich N äquivalente Basiszustände. Wird hingegen das System in zwei Dimensionen betrachtet, so können die beiden Spin down entweder übernächste Nachbarn in x -Richtung oder übernächste Nachbarn in y -Richtung sein. Es existieren somit $2N$ äquivalente Basiszustände. Dies setzt sich in noch

höheren Dimensionen entsprechend fort und zeigt sich in ähnlicher Weise für Konfigurationen mit mehr Spin down und größeren Kinkzahlen.

Mithilfe der Näherung in (4.113) ergibt sich für die Zeitentwicklung in der Eigenbasis des Hamiltonoperators nach dem Quench in (4.112)

$$|\Psi(t)\rangle \approx \sum_{m,n} \underbrace{\sum_{\lambda} e^{iE_{\lambda}t} \langle \Psi_{\lambda} | \Psi(t=0) \rangle c_{m,n}^{\lambda}}_{\alpha_{m,n}(t)} |\Psi_{m,n}\rangle . \quad (4.115)$$

Die Ansatzfunktion für das Variations-Monte-Carlo-Verfahren zur Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase ausgehend von dem vollständig magnetisierten Zustand ist somit gegeben durch

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{m,n} \alpha_{m,n}(t) |\Psi_{m,n}\rangle . \quad (4.116)$$

Die $\alpha_{m,n}(t)$ sind die zeitabhängigen Variationsparameter. Ihre Anfangswerte sind reellwertig. Sie lauten

$$\alpha_{m,n}(t=0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{für } (m,n) = (0,0) \text{ bzw. } (N,0) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.117)$$

Unter der unitären Zeitentwicklung sind die $\alpha_{m,n}(t)$ im Allgemeinen komplexwertig.

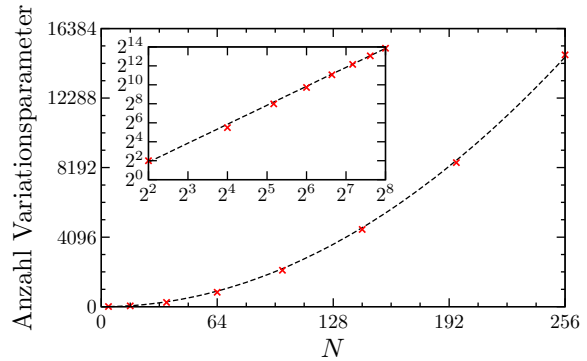
Der Ansatz unterteilt den Hilbertraum in Unterräume aus Zuständen mit der gleichen Magnetisierung $\mu_m^x = \frac{N-2m}{N}$ und dem gleichen Energiebeitrag des Diagonalanteils des Hamiltonoperators zur Gesamtenergie des Systems $\varepsilon_n^{xx} = \frac{N-n}{N}$. Die Unterräume werden mit $\mathcal{H}_{m,n}$ bezeichnet und es ist $\dim(\mathcal{H}_{m,n}) = N_{m,n}$, wobei $\sum_n N_{m,n} = \binom{N}{m}$. Übergänge zwischen den Unterräumen werden durch Spinflips vermittelt. In der \mathbf{x} -Basis werden Spinflips durch die Wirkung der Operatoren $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^y$ sowie $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ hervorgerufen. Im Hamiltonoperator des transversalen Ising-Modells tauchen nur die Operatoren $\hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^z$ auf. Sie sind an das externe transversale Feld gekoppelt. Übergänge zwischen den Unterräumen werden somit durch die Wirkung des externen transversalen Feldes hervorgerufen. Durch den Umklapp eines Spins wird die Anzahl m der Spin down des Systems um 1 erhöht oder erniedrigt und die Anzahl der Kinks ändert sich um ± 4 , ± 2 oder 0. Somit ist jeder Unterraum des Systems mit bis zu 10 anderen Unterräumen verbunden. Es werden nun zwei Unterräume (m,n) und (m',n') betrachtet. Die Anzahl der Übergänge zwischen (m,n) und (m',n') werde mit $T_{m,n;m',n'}$ bezeichnet. $T_{m,n;m',n'}$ ist symmetrisch bzgl. der Vertauschung von (m,n) und (m',n') . Weiterhin gilt $\sum_{m',n'} T_{m,n;m',n'} = N \cdot N_{m,n}$.

Die Anzahl der Unterräume (m,n) und somit der Variationsparameter wächst in führender Ordnung quadratisch mit der Anzahl N der Spins des Systems. Dies ergibt sich daraus, dass die möglichen Werte der Anzahl m der Spin down durch $N+1$ gegeben ist. Die möglichen Werte der Kinkzahl n sind wiederum abhängig von m . Im Falle des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells betrifft diese Abhängigkeit sowohl die minimale Anzahl an Kinks für ein gegebenes m als auch ihre maximale Anzahl. Demgegenüber beträgt die minimale Anzahl an Kinks für das eindimensionale transversale Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen für $0 < m < N$ immer 2. Auf die genauen möglichen Werte von n in Abhängigkeit von m wird im weiteren Verlauf der Dissertation noch genauer eingegangen werden. Ihre Anzahl wächst aber ebenfalls in führender Ordnung linear mit N , sodass sich die quadratische Abhängigkeit der Anzahl der Variationsparameter mit der Anzahl der Spins des Systems ergibt. Somit wird durch die Variationswellenfunktion (4.116) zur Beschreibung des Systems nach den Feldquenchs wie im Falle des Jastrowansatzes für die Wechselwirkungsquenchs die Anzahl der zu berücksichtigenden Parameter für die Zeitentwicklung des Systems von einem Wert, der exponentiell mit der Systemgröße gemäß 2^N anwächst, reduziert zu einem Wert, der algebraisch mit N anwächst. Im Falle der Feldquenchs ist die führende Ordnung quadratisch in N , wohingegen für die Wechselwirkungsquenchs die führende Ordnung linear in N ist. Weiterhin bleibt die Symmetrie des Anfangszustandes für endliche Systemgrößen unter der unitären Zeitentwicklung erhalten. Aus diesem Grund genügt die explizite Betrachtung der Variationsparameter mit $0 \leq m \leq \frac{N}{2}$. Die Variationsparameter mit $m > \frac{N}{2}$ ergeben sich dann gemäß $\alpha_{m,n}(t) = \alpha_{N-m,n}(t)$. Die genaue Anzahl der Variationsparameter für die im Folgenden betrachteten sowie einige weitere Systemgrößen sei an dieser Stelle bereits vorweggenommen. Die Werte können Tabelle 4.2 entnommen werden. In Abbildung 4.23 ist der in führender Ordnung quadratische Verlauf ihrer Anzahl mit der Systemgröße dargestellt.

L	2	4	6	8	10	12	14	16
N	4	16	36	64	100	144	196	256
Anzahl der Variationsparameter	4	45	255	848	2144	4551	8489	14834

Tabelle 4.2: Anzahl der unterschiedlichen Variationsparameter $\alpha_{m,n}(t)$ in der Ansatzfunktion (4.116) zur Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells auf dem Quadratgitter mit Kantenlänge L nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase. In führender Ordnung wächst die Anzahl der Variationsparameter mit $N^2 = L^4$.

Abbildung 4.23: Anzahl der unterschiedlichen Variationsparameter $\alpha_{m,n}(t)$ in der Ansatzfunktion (4.116) zur Beschreibung der Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells auf dem Quadratgitter mit Kantenlänge L nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase. Die Datenpunkte geben die Werte der Anzahl der Variationsparameter in Abhängigkeit von der Systemgröße N an. Bei der gestrichelten Linie handelt es sich um einen Least-Square-Fit mit $a \cdot N^2$. In der eingebetteten Grafik erfolgt die Auftragung doppeltlogarithmisch zur Veranschaulichung des Wachstums mit N^2 .



Die Bestimmung der $N_{m,n}$ und der $T_{m,n;m',n'}$ ist ein rein kombinatorisches Problem. Die Dimensionen der Unterräume sowie die Anzahl der Übergänge zwischen ihnen hängen ausschließlich von der Systemgröße ab. Insbesondere sind sie unabhängig von den Parametern des Hamiltonoperators und somit auch von dem betrachteten Quenchprotokoll, müssen also für eine gegebene Systemgröße lediglich ein einziges Mal bestimmt werden. Auf ihre Bestimmung wird im weiteren Verlauf der Dissertation eingegangen werden. Zunächst werden jedoch die sich aus dem Ansatz (4.116) ergebenden Bewegungsgleichungen der Variationsparameter $\alpha_{m,n}(t)$ nach den Feldquenchs bestimmt.

Bewegungsgleichungen

Den Ausgangspunkt zur Herleitung der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter bildet wiederum die Minimierung des euklidischen Abstandes zwischen der exakten Zeitentwicklung der Variationswellenfunktion des Systems zu einem gegebenen Zeitpunkt t und ihrer Variationszeitentwicklung. Die exakte Zeitentwicklung des Variationszustandes ist durch die Schrödingergleichung bestimmt gemäß

$$|\dot{\Psi}_{\text{exakt}}(t)\rangle = -i\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{4.118}$$

und die Variationszeitentwicklung ist durch die partielle Ableitung der Variationswellenfunktion nach der Zeit gegeben

$$|\dot{\Psi}_{\text{var}}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle . \tag{4.119}$$

Der euklidische Abstand wird in der \mathbf{x} -Basis bestimmt. Die Summation über alle Basiszustände wird aufgespalten in Summationen über die einzelnen Unterräume (m, n) . Somit ergibt sich für den euklidischen Abstand der exakten und der Variationszeitentwicklung

$$\mathcal{D}(t) = \sqrt{\sum_{m',n',k'} \left| \langle \Psi_{m',n'}^{k'} | \dot{\Psi}_{\text{exakt}}(t) \rangle - \langle \Psi_{m',n'}^{k'} | \dot{\Psi}_{\text{var}}(t) \rangle \right|^2} . \tag{4.120}$$

Die Summation über m' läuft über alle möglichen Anzahlen an Spin down im System, d. h. von 0 bis N , die Summation über n' über alle erlaubten Kinkzahlen für ein gegebenes m und die Summation über

k' über alle Basiszustände, die zum Unterraum (m', n') gehören. Einsetzen der Variationswellenfunktion (4.116) ergibt

$$\mathcal{D}(t) = \sqrt{\sum_{m',n',k'} \left| -i \sum_{m,n} \frac{\alpha_{m,n}(t)}{\sqrt{N_{m,n}}} \sum_k \langle \Psi_{m',n'}^{k'} | \hat{H} | \Psi_{m,n}^k \rangle - \frac{\dot{\alpha}_{m',n'}(t)}{\sqrt{N_{m',n'}}} \right|^2}. \quad (4.121)$$

Offensichtlich ist der euklidische Abstand der exakten und der Variationszeitentwicklung minimal, wenn jeder einzelne Summand verschwindet. Hieraus ergibt sich die Bedingung

$$\frac{i\dot{\alpha}_{m',n'}(t)}{\sqrt{N_{m',n'}}} = \sum_{m,n} \frac{\alpha_{m,n}(t)}{\sqrt{N_{m,n}}} \sum_k \langle \Psi_{m',n'}^{k'} | \hat{H} | \Psi_{m,n}^k \rangle. \quad (4.122)$$

Es wird nun über alle Zustände des Unterraumes (m', n') summiert. Der Summationsindex dieser Summation werde mit k' bezeichnet. Die Terme der linken Seite der Gleichung haben für jeden Basiszustand der \mathbf{x} -Basis aus dem Unterraum (m', n') den gleichen Wert. Die Summation entspricht somit einer Multiplikation mit der Dimensionalität $N_{m',n'}$ des Unterraumes (m', n') . Auf der rechten Seite besteht eine Abhängigkeit der Summanden von k' , sodass hier die Summation explizit ausgeführt werden muss. Es ergibt sich somit

$$i\sqrt{N_{m',n'}}\dot{\alpha}_{m',n'}(t) = \sum_{m,n} \frac{\alpha_{m,n}(t)}{\sqrt{N_{m,n}}} \sum_{k,k'} \langle \Psi_{m',n'}^{k'} | \hat{H} | \Psi_{m,n}^k \rangle. \quad (4.123)$$

Bei der Auswertung der Matrixelemente auf der rechten Seite der Gleichung ist zwischen der Wirkung des Diagonalanteils und des Nichtdiagonalanteils des Hamiltonoperators zu unterscheiden. Aus dem Diagonalanteil ergeben sich $N_{m',n'}$ Beiträge, die jeweils den Wert $-J(N-n')$ haben. Der Nichtdiagonalanteil ist durch die Anzahl der Übergänge zwischen den Unterräumen (m, n) und (m', n') multipliziert mit $-h/2$ gegeben. Somit folgt

$$i\sqrt{N_{m',n'}}\dot{\alpha}_{m',n'}(t) = -J \frac{\alpha_{m',n'}(t)}{\sqrt{N_{m',n'}}} (N-n')N_{m',n'} - \frac{h}{2} \sum_{m,n} \frac{\alpha_{m,n}(t)}{\sqrt{N_{m,n}}} T_{m',n';m,n}. \quad (4.124)$$

Division durch $\sqrt{N_{m',n'}}$ ergibt schließlich

$$i\dot{\alpha}_{m',n'}(t) = -J(N-n')\alpha_{m',n'}(t) - \frac{h}{2} \sum_{m,n} \underbrace{\frac{T_{m',n';m,n}}{\sqrt{N_{m',n'}}\sqrt{N_{m,n}}}}_{t_{m',n';m,n}} \alpha_{m,n}(t). \quad (4.125)$$

Dies sind die Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Feldquenchs ausgehend von der Ansatzfunktion (4.116). Bei ihnen handelt es sich um ein System gekoppelter linearer Differentialgleichungen mit konstanten (zeitunabhängigen) Koeffizienten. Die Zeitunabhängigkeit der Koeffizienten stellt einen entscheidenden Unterschied zu den Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs in (4.109) dar, die sich aus dem Jastrowansatz (4.103) ergeben. Die Koeffizienten der Differentialgleichungen müssen somit nur ein einziges Mal bestimmt werden, wobei die Koeffizienten der Beiträge, die sich aus dem Diagonalanteil des Hamiltonoperators ergeben, bereits bekannt sind. Es verbleibt somit lediglich die Bestimmung der $t_{m',n';m,n}$. Diese sind wie die $T_{m',n';m,n}$ symmetrisch bzgl. der Vertauschung von (m, n) und (m', n') . Für die Anzahl der Übergänge $T_{m',n';m,n}$ zwischen den Unterräumen (m', n') und (m, n) sowie die Dimensionalität $N_{m,n}$ bzw. $N_{m',n'}$ der Unterräume (m, n) bzw. (m', n') wurde bereits erläutert, dass sie lediglich von der Systemgröße N abhängig sind und nicht von den Parametern des Hamiltonoperators und somit auch nicht von dem betrachteten Quenchprotokoll. Diese Unabhängigkeit von dem Quenchprotokoll besteht somit auch für die $t_{m',n';m,n}$. Auf die Bestimmung der $t_{m',n';m,n}$ wird im folgenden Abschnitt eingegangen werden. Die Summation über m und n läuft über alle Unterräume, die ausgehend von (m', n') durch Umklapp eines einzelnen Spins erreicht werden können. Da jeder Unterraum durch den Umklapp eines einzelnen Spins mit lediglich bis zu 10 anderen Unterräumen verknüpft ist, kann das Gleichungssystem durch eine dünn besetzte Matrix (Sparse Matrix) dargestellt werden. Die numerische Integration der Bewegungsgleichungen erfolgt wiederum mit der aus den Numerical Recipes in C++ [219] entnommenen Routine *rk4.cpp* für ein Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung. Die Anfangswerte der Variationsparameter wurden bereits in (4.117) angegeben.

Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter

Um die Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Feldquenchs lösen zu können, müssen noch die Koeffizienten

$$t_{m,n;m',n'} := \frac{T_{m,n;m',n'}}{\sqrt{N_{m,n}}\sqrt{N_{m',n'}}} \quad (4.126)$$

bestimmt werden. Hierzu sind sowohl die Dimensionalität aller Unterräume des Hilbertraumes des Systems als auch alle Übergänge zwischen ihnen erforderlich. Für das eindimensionale transversale Ising-Modell auf der linearen Kette mit periodischen Randbedingungen existieren analytischen Ausdrücke für die gesuchten Größen. Auf diese wird in Anhang D eingegangen und die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens werden mit den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik verglichen. Für das zweidimensionale transversale Ising-Modell hingegen, dem das eigentliche Interesse der Betrachtungen gilt, sind keine analytischen Ausdrücke für die $t(m, n; m', n')$ bekannt. Aufgrund des exponentiellen Wachstums der Dimensionalität des Hilbertraumes mit der Systemgröße können die $N_{m,n}$ sowie die $T_{m,n;m',n'}$ lediglich für kleine Systemgrößen bis hin zu 6×6 durch Abzählen bestimmt werden. Zu diesem Zweck werden alle möglichen Konfigurationen des Systems durchlaufen und für jede Konfiguration die Anzahl m der Spin down sowie die Anzahl n der Kinks bestimmt. Zur Bestimmung der Übergänge muss neben der Orientierung eines Spins auch die Orientierung seiner nächsten Nachbarn betrachtet werden. Hierbei ergeben sich 10 mögliche Konfigurationen aus der Orientierung des betrachteten Spins sowie der Anzahl unmittelbar benachbarter Spin down bzw. Spin up entsprechend den bis zu 10 Unterräumen, mit denen jeder Unterraum des Hilbertraumes durch Umklappen eines einzelnen Spins verknüpft ist. In Tabelle 4.3 sind diese Konfigurationen sowie die zugehörigen Übergänge zusammengefasst. Für größere Systeme können die $N_{m,n}$ sowie die $T_{m,n;m',n'}$ mithilfe von Monte-Carlo-Verfahren bestimmt werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass es mit Standard-Monte-Carlo-Verfahren aufgrund von Unterschieden der Dimensionalität der einzelnen Unterräume des Hilbertraumes von zum Teil vielen Größenordnungen nicht möglich ist, innerhalb einer endlichen Laufzeit eine zuverlässige Schätzung der Dimensionalität der kleinen Unterräume sowie der Übergänge aus ihnen heraus bzw. in sie hinein zu erhalten. Aus diesem Grund wird im Folgenden Rare Event Sampling (RES) verwendet. Rare Event Sampling stellt einen Oberbegriff für verschiedene Monte-Carlo-Verfahren dar, die selektiv Stichproben für bestimmte Regionen des Konfigurationsraumes erzeugen, die durch Brute-Force-Methoden nur mit geringer Wahrscheinlichkeit erreicht werden und infolgedessen eine große Anzahl erzeugter Stichproben und somit lange Laufzeiten bedingen würden. Das im Rahmen der vorliegenden Dissertation angewendete Verfahren zur Bestimmung der $N_{m,n}$ sowie der $T_{m,n;m',n'}$ geht zurück auf Alexander Hartmann [246]. Das Verfahren sowie seine Anwendung auf das vorliegende Problem werden in Anhang E detailliert beschrieben.

	Orientierung des Spins	Anzahl Spin down nächste Nachbarn	Anzahl Spin up nächste Nachbarn	Übergang
0	down	4	0	$(m, n) \rightarrow (m - 1, n + 4)$
1	down	3	1	$(m, n) \rightarrow (m - 1, n + 2)$
2	down	2	2	$(m, n) \rightarrow (m - 1, n)$
3	down	1	3	$(m, n) \rightarrow (m - 1, n - 2)$
4	down	0	4	$(m, n) \rightarrow (m - 1, n - 4)$
5	up	4	0	$(m, n) \rightarrow (m + 1, n - 4)$
6	up	3	1	$(m, n) \rightarrow (m + 1, n - 2)$
7	up	2	2	$(m, n) \rightarrow (m + 1, n)$
8	up	1	3	$(m, n) \rightarrow (m + 1, n + 2)$
9	up	0	4	$(m, n) \rightarrow (m + 1, n + 4)$

Tabelle 4.3: Mit dem Umklapp eines Spins verknüpfte Übergänge zwischen den Unterräumen. Die ursprüngliche Konfiguration des Systems gehöre zu dem Unterraum (m, n) .

Bestimmung der Observablen

Während die zeitabhängigen Erwartungswerte der Korrelationsfunktionen und des Betrages der Magnetisierung sowie die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren im Rahmen des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens nach den Wechselwirkungsquenchs unter Verwendung des Jastrowansatzes durch den Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus bestimmt werden, existieren nach den Feldquenchs direkte funktionale Zusammenhänge zwischen der Korrelationsfunktion nächster Nachbarn sowie dem Betrag der Magnetisierung zu den Variationsparametern $\alpha_{m,n}(t)$ der Ansatzfunktion (4.116). Für den Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung des Systems zum Zeitpunkt t lautet dieser Zusammenhang

$$\mu_{\mathbb{B}}^x(t) = \langle \hat{\mu}_{\mathbb{B}}^x \rangle_t = \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \cdot |\mu_m^x|. \quad (4.127)$$

Dabei sind die μ_m^x die Eigenwerte von $\hat{\mu}^x$ gemäß (4.13) und die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Magnetisierung des Systems zum Zeitpunkt t den Wert μ_m^x zu erhalten, ist gegeben durch

$$p_t(\mu_m^x) = \sum_n |\alpha_{m,n}(t)|^2. \quad (4.128)$$

Der Erwartungswert der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn ergibt sich zu

$$C_{\text{nn}}^{xx}(t) = \langle \hat{C}_{\text{nn}}^{xx} \rangle_t = \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \cdot \varepsilon_n^{xx} \quad (4.129)$$

mit den ε_n^{xx} gemäß (4.14). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der ε_n^{xx} ist dabei

$$p_t(\varepsilon_n^{xx}) = \sum_m |\alpha_{m,n}(t)|^2. \quad (4.130)$$

Zur Bestimmung des Erwartungswertes der Korrelationsfunktion zwischen weiter voneinander entfernten Positionen des Systems sind zusätzlich die Werte

$$C_{\mathbf{r}}(m, n) := \frac{1}{N_{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} \sum_k \langle \Psi_{m,n}^k | \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^x \hat{\sigma}_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^x | \Psi_{m,n}^k \rangle \quad (4.131)$$

erforderlich. Ihre Bestimmung erfolgt im Rahmen des in Anhang E beschriebenen Monte-Carlo-Verfahrens für die $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$. Mithilfe der $C_{\mathbf{r}}(m, n)$ kann der Erwartungswert der Korrelationsfunktion zweier Spins im Abstand \mathbf{r} zum Zeitpunkt t geschrieben werden als

$$C_{\mathbf{r}}^{xx}(t) = \langle \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle_t = \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \cdot C_{\mathbf{r}}(m, n). \quad (4.132)$$

Überprüfung des Algorithmus

Nach der Herleitung der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Feldquenchs sowie der Beschreibung der Bestimmung der Observablen wird der Algorithmus im Folgenden überprüft. Hierzu wird wie im Falle der Wechselwirkungsquenchs das System der Größe 4×4 betrachtet, dessen Zeitentwicklung noch mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung bestimmt werden kann. In Abbildung 4.24 werden der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ bestimmt mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens mit den exakten Ergebnissen verglichen. Die Zeitmittel wurden dabei über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Abbildung 4.25 zeigt einen entsprechenden Vergleich für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte ε_n^{xx} von \hat{C}_{nn}^{xx} . Betrachtet werden die zu Beginn des Kapitels angegebenen Quenchprotokolle und es werden die durch Abzählen bestimmten Werte der $t_{m,n;m',n'}$ für das Variations-Monte-Carlo-Verfahren verwendet. Für die betrachteten Quenchprotokolle zeigt sich für das 4×4 -System eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Resultaten der numerischen Zeitentwicklung der Schrödingergleichung sowie des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens.

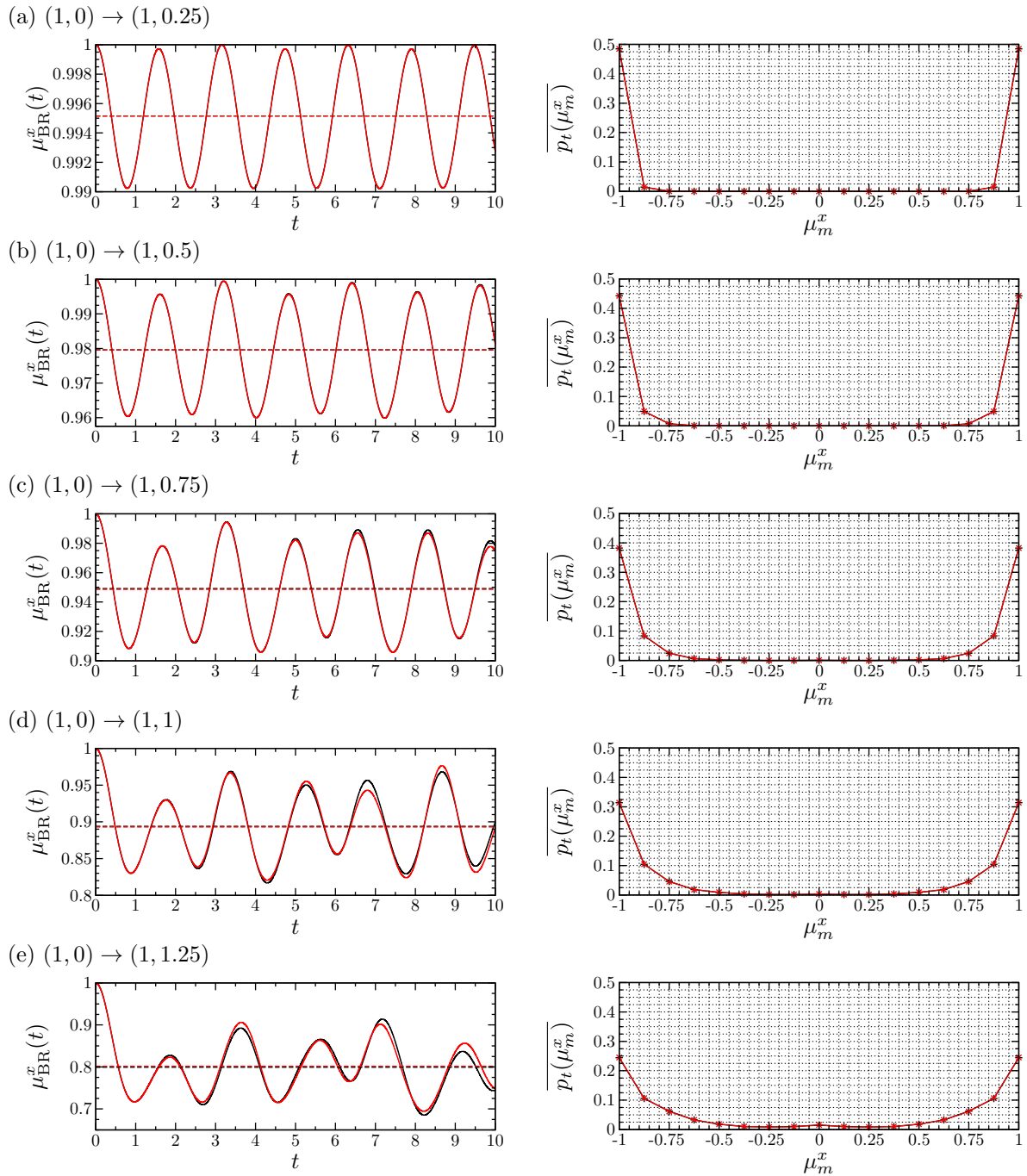
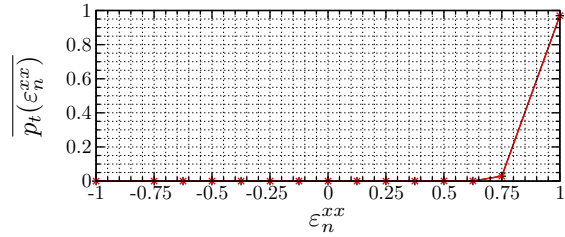
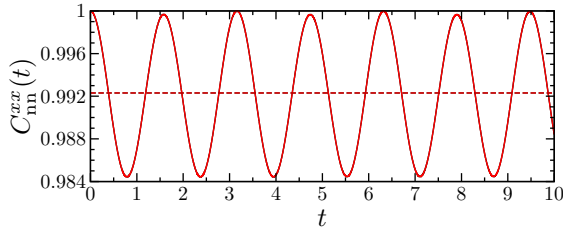
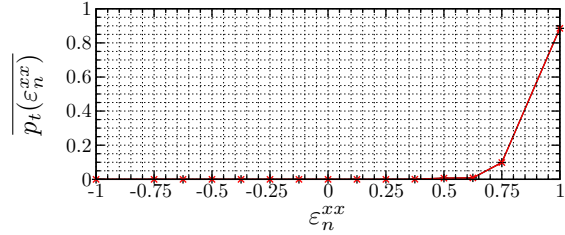
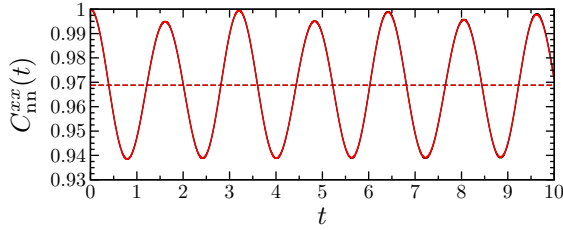


Abbildung 4.24: (a) - (e) Vergleich zwischen mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung bestimmten Resultaten (—) für die Magnetisierung des Systems und Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung der Variationswellenfunktion (4.116) (---) nach Feldquenchs. Die Graphen in der linken Spalte stellen den zeitlichen Verlauf des renormierten Betrages der Magnetisierung dar. Die gestrichelten Linien sind die Zeitmittel der entsprechenden Kurven. Die Graphen der rechten Spalte zeigen die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Werte der Magnetisierung des Systems. Die Zeitmittel wurden jeweils über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Bei Betrachtung der Zeitentwicklung zeigen sich für die stärksten Quenches leichte Abweichungen in Bezug auf die Amplitude der auftretenden Oszillationen. Die Frequenz der Oszillationen und die zeitlichen Mittelwerte sowohl der Observablen μ_{BR}^x als auch der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x werden sehr gut reproduziert mit sehr kleinen Abweichungen lediglich für den stärksten betrachteten Feldquench $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

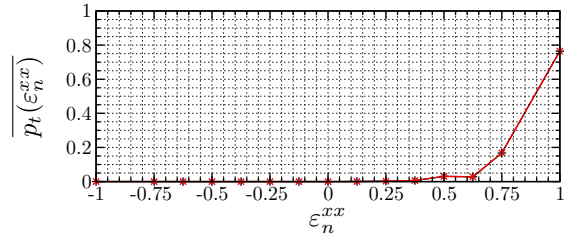
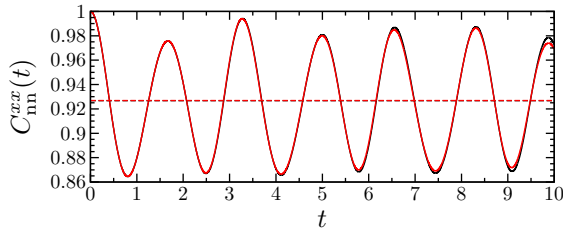
(a) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$



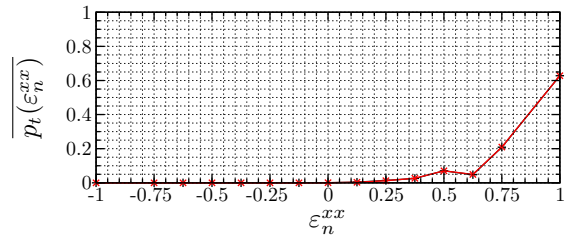
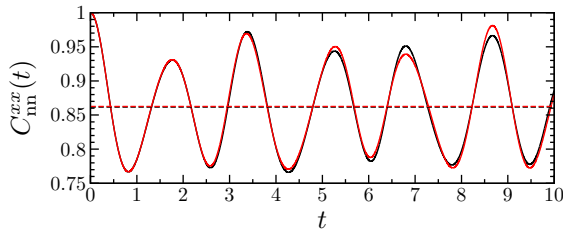
(b) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$



(c) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$



(d) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$



(e) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$

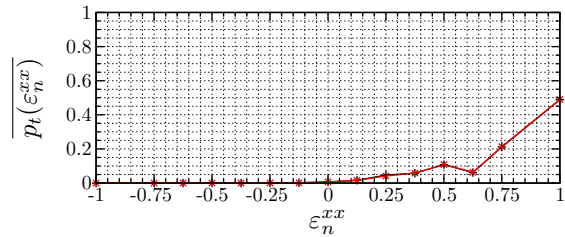
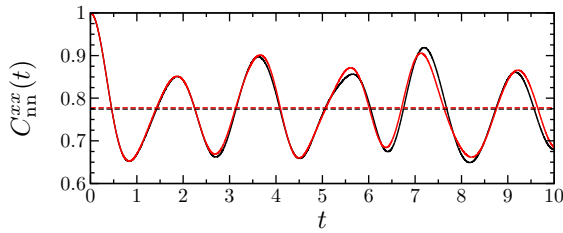
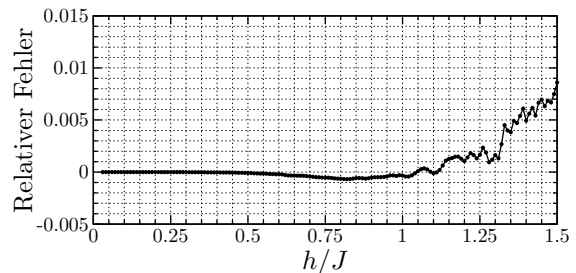
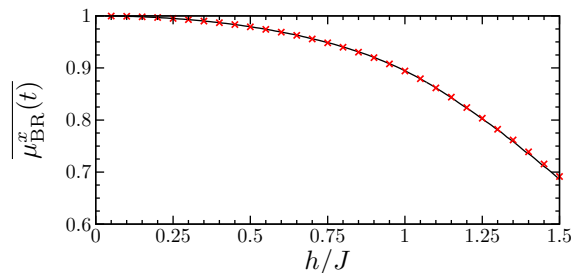


Abbildung 4.25: (a)-(e) Vergleich zwischen mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung bestimmten Resultaten (—) für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn und Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung der Variationswellenfunktion (4.116) (---) nach Feldquenchs. Die Graphen in der linken Spalte stellen den zeitlichen Verlauf der Korrelationsfunktion dar. Die gestrichelten Linien sind die Zeitmittel der entsprechenden Kurven. Die Graphen der rechten Spalte zeigen die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Werte von ϵ_n^{xx} . Die Zeitmittel wurden jeweils über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Bei Betrachtung der Zeitentwicklung zeigen sich für die stärksten Quenchs leichte Abweichungen in Bezug auf die Amplitude der auftretenden Oszillationen. Die Frequenz der Oszillationen und die zeitlichen Mittelwerte sowohl der Observablen C_{nn}^{xx} als auch der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der ϵ_n^{xx} werden sehr gut reproduziert mit sehr kleinen Abweichungen lediglich für den stärksten betrachteten Feldquench $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung



(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

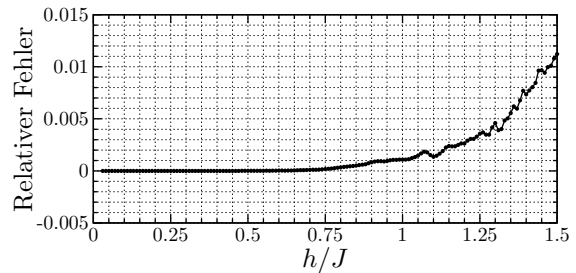
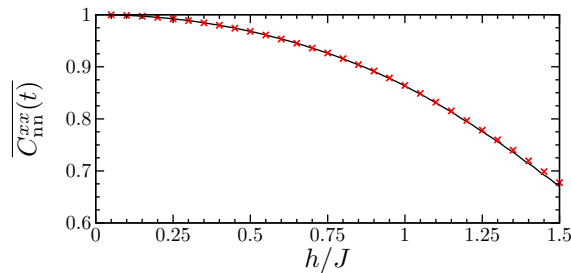


Abbildung 4.26: Vergleich der Zeitmittelwerte (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn für das 4×4 -System nach den Feldquenchs bestimmt mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung (—) und mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung der Ansatzfunktion in (4.116) (\times). Zusätzlich ist der relative Fehler der Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens aufgetragen. Es zeigt sich, dass der relative Fehler für $h/J \leq 1$ in guter Näherung konstant ist und weniger als 1 Promille beträgt. Für größere Verhältnisse h/J wächst der Fehler schnell an und überschreitet bei $h/J \approx 1.5$ den Wert von 1%.

Diese Übereinstimmung bleibt auch für größere Zeiten als das Zeitintervall $[0, 10]$ erhalten, auf das sich aus Darstellungsgründen in den Abbildungen beschränkt wurde. Die Frequenz der auftretenden Oszillationen im zeitlichen Verlauf sowohl des renormierten Betrages der Magnetisierung als auch der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn wird durch das Variations-Monte-Carlo-Verfahren hervorragend wiedergegeben. Bei Betrachtung der Amplituden zeigen sich für die stärkeren Quenchs geringfügige Abweichungen zwischen den exakten Resultaten und den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens, die jedoch nur einen unwesentlichen Einfluss auf den zeitlichen Mittelwert haben, der ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung aufweist. Die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sowohl der μ_n^x als auch der ε_n^{xx} stimmen für alle betrachteten Quenchprotokolle ebenfalls überein. Insgesamt zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den exakten Resultaten und den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens, wobei die Übereinstimmung umso besser ist, je kleiner das Verhältnis h/J ist. Dies wurde bereits bei der Herleitung der Ansatzfunktion angemerkt und bildet einen Gegensatz zu den Wechselwirkungsquenchs, nach denen aufgrund des verwendeten Jastrowansatzes die Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems umso exakter ist, je größer das Verhältnis h/J ist. Zur Quantifizierung der Abweichungen zwischen der exakten Zeitentwicklung sowie der Zeitentwicklung der Observablen mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens nach den Feldquenchs im 4×4 -System ist in Abbildung 4.26 der Verlauf der Zeitmittelwerte für das mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zeitentwickelte System sowie das mithilfe numerischer Integration der Schrödingergleichung exakt in der Zeit propagierte System in Abhängigkeit von h/J sowie der relative Fehler der Ergebnisse des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens dargestellt. Wie Abbildung 4.26 entnommen werden kann, bleibt der relative Fehler der Zeitmittelwerte des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens bis hin zu $h/J = 1$ unter 1 Promille. Für größere Verhältnisse h/J wächst der Fehler an und erreicht bei etwa $h/J = 1.5$ einen Wert von 1%. Die in der Abbildung dargestellten Zeitmittel wurden über das Zeitintervall $[0, 100]$ gebildet. Abbildung 4.27, in der die zeitgemittelten Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens für die Zeitintervalle $[0, 10]$, $[0, 25]$, $[0, 50]$ und $[0, 100]$ dargestellt sind, zeigt, dass die Bildung des Zeitmittels dabei wie bereits für die Wechselwirkungsquenchs stabil gegenüber Änderung des Zeitintervalls ist. Ein Vergleich der

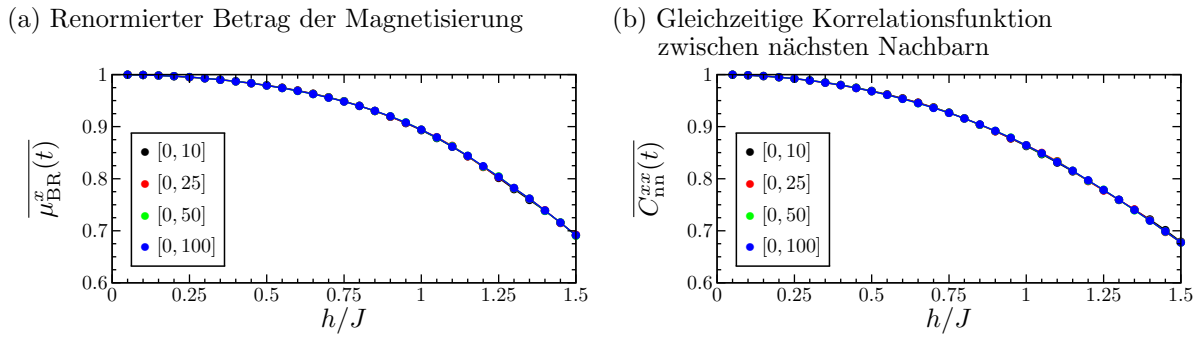


Abbildung 4.27: Einfluss der Länge des Zeitintervalls, über das das Zeitmittel gebildet wird, auf den Zeitmittelwert (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn für das 4×4 -System nach den Feldquenchs. Betrachtet werden die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung der Ansatzfunktion (4.116). Bereits das Zeitmittel über das kurze Zeitintervall $[0, 10]$ ist stabil gegenüber einer Verlängerung des Zeitintervalls.

Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zu exakten Resultaten ist wiederum nur für das 4×4 -System möglich. Da durch die Ansatzfunktion (4.116) nur Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn unmittelbar erfasst werden, ist eine Abnahme der Genauigkeit der Approximation der exakten Zeitentwicklung mit zunehmender Größe des Systems zu erwarten. Aufgrund der hohen Anzahl an Symmetrien innerhalb des zweidimensionalen Quadratgitters und der Bedeutung insbesondere kurzreichweitiger Korrelationen innerhalb der ferromagnetischen Phase wird diese Abnahme der Genauigkeit bei Beschränkung der Betrachtungen auf Quenchprotokolle, für die das System die ferromagnetische Phase nicht verlässt, nur geringfügig sein und sich hauptsächlich auf den genauen zeitlichen Verlauf der Erwartungswerte der Observablen und weniger auf ihre zeitlichen Mittelwerte auswirken.

4.8.3 Resultate

Im Anschluss an die Beschreibung der Anwendung des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs widmet sich das folgende Kapitel der Diskussion der gewonnenen Resultate für die beiden Quenchprotokolle. Für die Systemgrößen 4×4 , 8×8 , 12×12 und 16×16 werden die Zeitentwicklung des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie der Korrelationsfunktionen zwischen nächsten Nachbarn bestimmt und ihre Zeitmittel sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren mit denjenigen des Systems im thermischen Gleichgewicht bei der dem System nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} verglichen. Die Ergebnisse für die unterschiedlichen Systemgrößen werden anschließend genutzt, um mithilfe von Finite-Size-Scaling Rückschlüsse auf das System im thermodynamischen Limes zu ziehen. Weiterhin werden für große Systemgrößen die zeitlichen Mittelwerte weiter voneinander entfernter Spins des Systems den thermischen Erwartungswerten gegenübergestellt.

Zeitentwicklung der Erwartungswerte der Observablen

Den Anfang der Betrachtungen bildet die Zeitentwicklung der Erwartungswerte des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn. Diese ist in den Abbildungen 4.28 und 4.29 für die unterschiedlichen Systemgrößen nach den verschiedenen betrachteten Quenchprotokollen für die Wechselwirkungs- und die Feldquenchs dargestellt. Im Falle der Wechselwirkungsquenchs wird die Zeitentwicklung auf dem Intervall $[0, 100]$ bestimmt, wobei sich die Graphen in Abbildung 4.28 aus Gründen der Ablesbarkeit auf das Zeitintervall $[0, 10]$ beschränken. Für die Feldquenchs in Abbildung 4.29 erfolgen die Betrachtungen auf dem Zeitintervall $[0, 25]$, da für größere Zeiten im Falle stärkerer Quenchs die Genauigkeit der Approximation für größere Systemgrößen abnimmt. Ursächlich hierfür ist die Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter durch das in Anhang E beschriebene Monte-Carlo-Verfahren. Dieses bestimmt die Koeffizienten zwar mit hoher Genauigkeit, jedoch akkumulieren sich die geringfügigen Abweichungen von den exakten

Werten im Laufe der Zeit. Aufgrund der größeren Anzahl an Variationsparametern für die größeren Systemgrößen sind diese stärker von diesem Effekt betroffen, sodass für sie die erreichbaren Zeiten geringer sind. Wie jedoch der Vergleich der Zeitmittelwerte in den Abbildungen 4.19 und 4.27 für das 4×4 -System gezeigt hat, ergibt bereits die Mittelung über diese Intervalllänge ein gegenüber Vergrößerung des Zeitintervalles stabiles Ergebnis für den zeitlichen Mittelwert.

Zunächst werde der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung nach den Wechselwirkungsquenchs betrachtet, der in den Graphen in Spalte (a) von Abbildung 4.28 dargestellt ist. Dieser weist starke Ähnlichkeiten zu einer harmonischen Schwingung auf. Amplitude sowie Frequenz der Schwingung werden durch das Verhältnis von h/J nach dem Quench bestimmt. Zudem besteht ein Einfluss der Systemgröße. Die Frequenz der Schwingungen ist für ein gegebenes Verhältnis von h/J in guter Näherung zeitlich konstant und wird nur geringfügig durch die Systemgröße beeinflusst. Lediglich für das 4×4 -System zeigen sich Abweichungen. Anschaulich kann dieses Verhalten dadurch erklärt werden, dass durch das transversale Feld Spins umgeklappt werden. Die Umklapprate ist umso höher, je größer das Verhältnis h/J ist. Da sich die Magnetisierung unmittelbar aus der Orientierung aller Spins des Systems ergibt, äußert sich eine höhere Umklapprate in einer höheren Frequenz der Oszillationen des zeitlichen Verlaufs des Erwartungswertes des Betrages der Magnetisierung. Dies ist insbesondere in der paramagnetischen Phase der Fall, in der das Transversalfeld gegenüber der Kopplung der Spins untereinander dominiert und der energetische Beitrag der relativen Orientierung benachbarter Spins zur Gesamtenergie gering ist im Vergleich zu dem Beitrag, der sich aus dem externen Transversalfeld ergibt. Die Betrachtung der Amplitude der Oszillationen des zeitlichen Verlaufs des Erwartungswertes des Betrages der Magnetisierung zeigt, dass mit kleiner werdendem Verhältnis h/J die Amplitude der Oszillationen zunimmt. Dies kann dadurch erklärt werden, dass sich das System nach dem Quench näher am kritischen Punkt und somit auch näher an der ferromagnetischen Phase befindet. Aufgrund der Nähe zum kritischen Punkt können die Spins leichter ausgelenkt werden, sodass die Amplitude der Oszillationen zunimmt. Zugleich nimmt aufgrund der größeren Nähe zur ferromagnetischen Phase der zeitliche Mittelwert zu. Bei dieser Zunahme handelt es sich um einen Finite-Size-Effekt. Die Magnetisierung stellt den Ordnungsparameter des Phasenüberganges des transversalen Ising-Modells im thermodynamischen Limes dar. Für endliche Systemgröße verschwindet ihr Betrag nicht in der paramagnetischen Phase und zeigt die beschriebene Zunahme der Amplitude der Oszillationen sowie des zeitlichen Mittelwertes mit kleiner werdendem Verhältnis h/J . Die Amplitude der Oszillationen für eine feste Systemgröße und ein festes Verhältnis h/J weist eine geringfügige Zeitabhängigkeit auf. Diese Änderungen der Amplitude mit der Zeit sind umso ausgeprägter, je kleiner das Verhältnis h/J ist. Dies erklärt sich wiederum durch die zunehmende Bedeutung der Kopplung der Spins untereinander für kleinere Werte des Transversalfeldes, die zu einer stärkeren Abweichung von einer harmonischen Schwingung führen.

Die Graphen in Spalte (b) von Abbildung 4.28 zeigen den zeitlichen Verlauf des Erwartungswertes der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Wechselwirkungsquenchs. Dieser weist unmittelbar nach dem Quench einen schnellen Anstieg auf und fällt anschließend auf seinen stationären Wert ab, um den er im weiteren Zeitverlauf oszilliert. Die Amplitude der Oszillationen ist zeitlich moduliert. Die Periodizität der Amplitudenmodulation wächst mit der Systemgröße an, wohingegen die maximale Amplitude der Oszillationen sowohl mit abnehmender Systemgröße als auch mit abnehmendem Verhältnis h/J zunimmt. Die Zunahme der Amplitude für kleine Werte von h/J erklärt sich dadurch, dass näher am kritischen Punkt die Spins leichter ausgelenkt werden können, und die Zunahme des zeitlichen Mittelwertes des Erwartungswertes der Korrelationsfunktion dadurch, dass für kleineres Verhältnis h/J die Kopplung der Spins untereinander an Bedeutung gewinnt und infolgedessen die Korrelationsfunktion zunimmt. Die Abnahme der Amplitude der Oszillationen mit der Systemgröße folgt aus der Abnahme der Bedeutung von Fluktuationen innerhalb des Systems mit der Systemgröße.

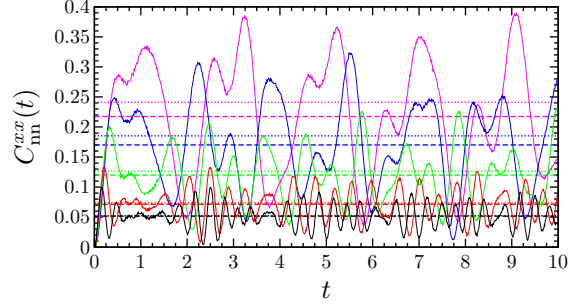
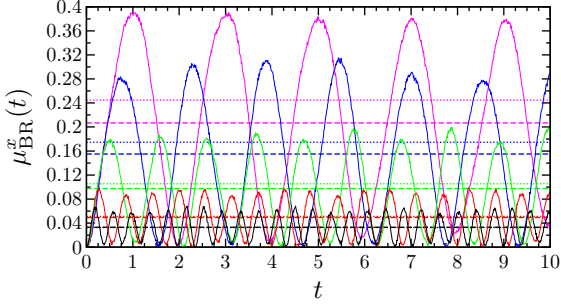
Nach Diskussion des zeitlichen Verlaufs der Observablen sowie der Einflussgrößen auf sie werden nun ihre zur Beantwortung der Frage des Auftretens von Thermalisierung erforderlichen Zeitmittelwerte betrachtet. Diese wurden über das Zeitintervall $[0, 100]$ berechnet und sind in Abbildung 4.28 als gestrichelte Linien eingezeichnet. Die gepunkteten Linien hingegen stellen die entsprechenden Erwartungswerte gemäß dem kanonischen Gibbs Ensemble für das System im thermischen Gleichgewicht bei der dem System nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} dar. Ein Vergleich der Zeit- und Ensemblemittel zeigt sowohl für den renormierten Betrag der Magnetisierung als auch für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn, dass die zeitlichen Mittelwerte unterhalb der Ensemblemittelwerte liegen. Die Abweichung ist hierbei umso größer, je kleiner das Verhältnis h/J ist, d. h. je stärker der betrachtete Wechselwirkungsquench ist und je näher er am Phasenübergang endet. Bezüglich der Nähe der

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$

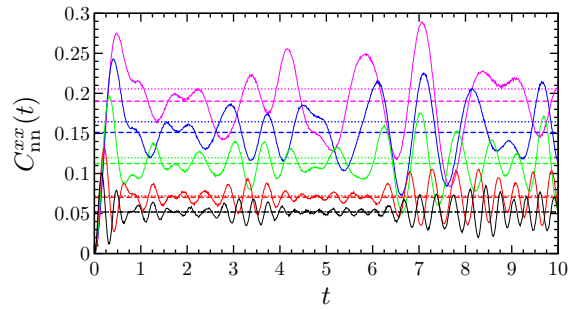
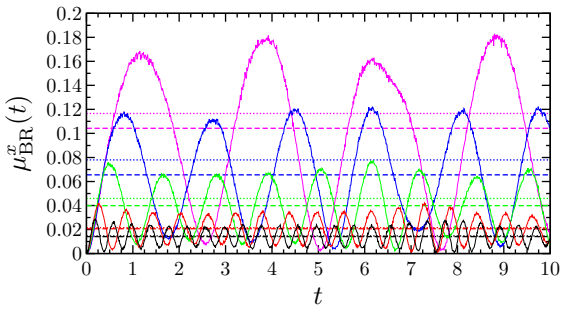
(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

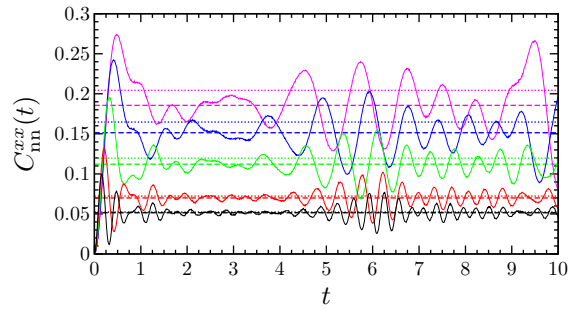
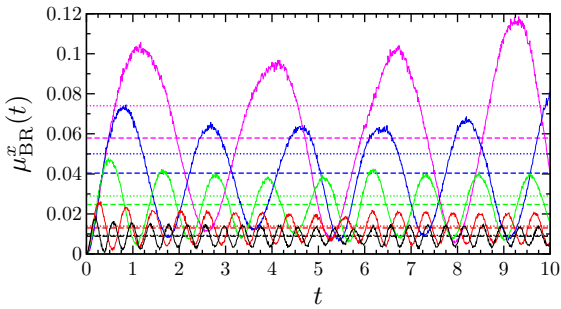
(i) $L = 4$



(ii) $L = 8$



(iii) $L = 12$



(iv) $L = 16$

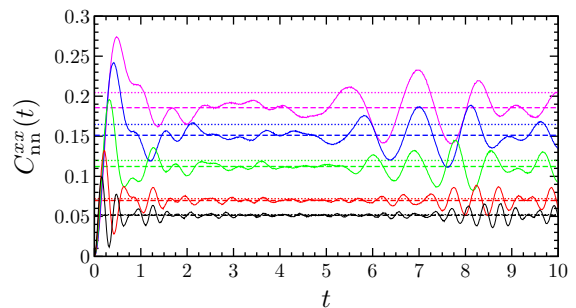
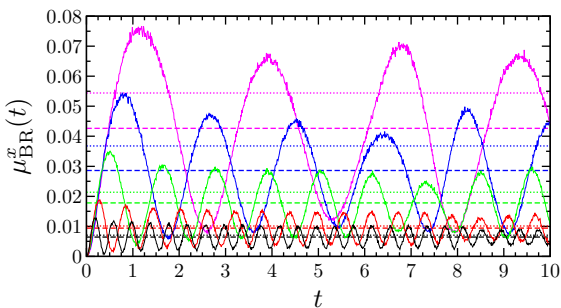


Abbildung 4.28: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Wechselwirkungsquenchs für die Systemgrößen (i) 4×4 , (ii) 8×8 , (iii) 12×12 und (iv) 16×16 . Der Farbcode lautet – $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, – $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, – $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, – $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$, – $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$. Gestrichelte Linien geben die zeitlichen Mittelwerte über das Zeitintervall $[0, 100]$ an und gepunktete Linien die thermischen Erwartungswerte der Observablen im System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} .

Endpunkte der Wechselwirkungsquenchs zum Phasenübergang sei auf Abbildung 4.13 (a) verwiesen, die die Endpunkte der Wechselwirkungsquenchs im $h/J - T/J$ -Diagramm zeigt.

Vor dem genaueren Vergleich der Zeit- und Ensemblemittelwerte als Funktion von h/J soll zunächst der zeitliche Verlauf der Erwartungswerte der Observablen nach den Feldquenchs betrachtet werden. Dieser ist in Spalte (a) von Abbildung 4.29 für den renormierten Betrag der Magnetisierung und in Spalte (b) für die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn dargestellt. Für schwache Quenchs, die im Falle der Wechselwirkungsquenchs einem kleinen Verhältnis h/J entsprechen, kann der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes beider Observablen in guter Näherung durch eine harmonische Schwingung beschrieben werden. Es zeigen sich lediglich kleine Abweichungen der Amplitude der Oszillationen. Die Erklärung für diesen Verlauf wurde für die Magnetisierung im Rahmen der störungstheoretischen Betrachtung der Feldquenchs gegeben. Für kleine Feldquenchs bis hin zu etwa $h/J = 0.5$ erlaubt bereits die erste nicht verschwindende nicht konstante Ordnung eine genaue Beschreibung der Zeitentwicklung des Erwartungswertes des Betrages der Magnetisierung. Diese ist von der Systemgröße unabhängig. Zur Beschreibung stärkerer Quenchs sind höhere Ordnungen der Entwicklung erforderlich. Bei diesen können sich im Vergleich zu den mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens betrachteten endlichen Systemgrößen Abweichungen ergeben. Dies kann anhand der anschaulichen Erklärung verstanden werden, die bei den Betrachtungen mithilfe der zeitabhängigen Störungstheorie dafür gegeben wurde, wann einer der sich in der Entwicklung (4.84) ergebenden Beiträge nicht verschwindet. Dies ist gerade dann der Fall, wenn die Anzahl der Umklapps eines jeden Spins gerade ist, d. h. jeder Spin, der umgeklappt wurde, auch wieder in seine ursprüngliche Orientierung zurückgebracht wird. Die Ordnung der Entwicklung bestimmt die Anzahl an Spinumklapps. Ist die Ordnung der Entwicklung, d. h. die Anzahl der Spinumklapps, hoch im Vergleich zur Systemgröße, so können die Positionen der umgeklappten Spins nicht frei voneinander gewählt werden, d. h. ein Spin muss mehrmals umgeklappt werden oder die umgeklappten Spins müssen nächste Nachbarn sein usw.. Hierdurch ergeben sich Abweichungen der störungstheoretischen Betrachtung endlicher Systeme im Vergleich zum System im thermodynamischen Limes. Die Amplitude der Oszillationen des zeitlichen Verlaufs des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung skaliert nach kleinen Quenches somit in führender Ordnung mit $(h/J)^2$, wohingegen die Kreisfrequenz der Schwingungen durch $4J$ gegeben ist. Für stärkere Quenchs hat das Kapitel zur störungstheoretischen Beschreibung des Relaxationsprozesses im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell gezeigt, dass die erreichbaren Ordnungen der Entwicklung nur für kleine Zeiten bis etwa 1.5 zur Beschreibung der Zeitentwicklung ausreichend sind. Aus diesem Grund existieren für diese Quenchs lediglich die Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens. Sie zeigen eine weitere Abnahme des zeitlichen Mittelwertes bei gleichzeitiger Zunahme der Amplitude der Oszillationen um diesen. Die Amplitude weist dabei insbesondere bei den Feldquenchs hin zu $h/J = 1$ sowie $h/J = 1.25$ eine starke Zeitabhängigkeit auf. Die Periodendauer der Oszillationen erweist sich für gegebenes Verhältnis h/J nach dem Quench als von der Systemgröße unabhängig. Weiterhin hat auch das Verhältnis von h/J im Gegensatz zu den Wechselwirkungsquenchs nur einen geringen Einfluss auf die Periodendauer. Diese nimmt mit steigendem h/J geringfügig zu. Die Amplitude der Oszillationen um den durch gestrichelte Linien dargestellten zeitlichen Mittelwert hingegen verringert sich mit der Systemgröße. Ursächlich hierfür ist die abnehmende Bedeutung von Fluktuationen mit der Systemgröße. Ein Vergleich der zeitlichen Mittelwerte zu den Erwartungswerten für das System im thermischen Gleichgewicht bei T_{eff} (gepunktete Linien) zeigt, dass die zeitlichen Mittelwerte des renormierten Betrages der Magnetisierung unterhalb der thermischen Erwartungswerte liegen. Die Abweichung verschwindet für schwache Feldquenchs nahezu und nimmt mit der Stärke der Feldquenchs bzw. der Nähe des Endpunktes des Quenchs zum Phasenübergang im $h/J - T/J$ -Diagramm zu.

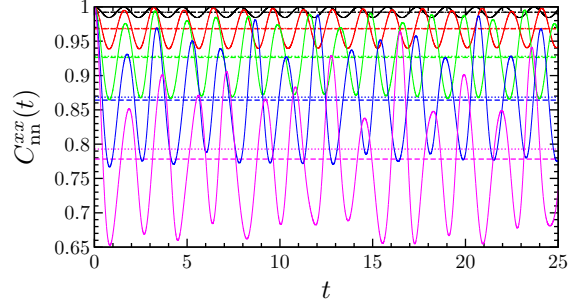
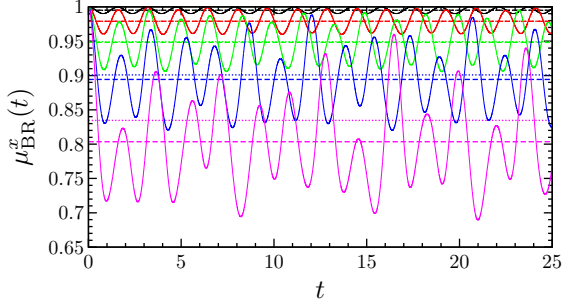
Die Graphen in Spalte (b) von Abbildung 4.29 zeigen den zeitlichen Verlauf des Erwartungswertes der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Feldquenchs für die verschiedenen Systemgrößen. Im Gegensatz zu den Wechselwirkungsquenchs weist dieser einen sehr ähnlichen Verlauf zum renormierten Betrag der Magnetisierung auf. Für kleine Feldquenchs folgt die Zeitentwicklung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn einer harmonischen Schwingung. Die Frequenz der Oszillationen stimmt dabei mit derjenigen des renormierten Betrages der Magnetisierung überein, wohingegen ihre Amplitude größer ist. Für die stärkeren Feldquenchs zeigt sich wiederum eine Zeitabhängigkeit der Amplitude. Ein Vergleich der zeitlichen Mittelwerte des Erwartungswertes der Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn zum thermischen Erwartungswert zeigt in Abhängigkeit von der Systemgröße ein unterschiedliches Verhalten. Für schwache Feldquenchs besteht für alle betrachteten Systemgrößen eine gute Übereinstimmung der zeitlichen Mittelwerte und der thermischen Erwartungswerte. Eine Abhängigkeit von der Systemgröße zeigt sich für stärkere Feldquenchs. Während für

Feldquenchs ($J, 0 \rightarrow (J, h)$)

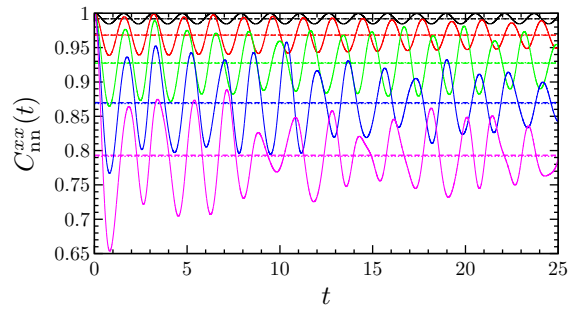
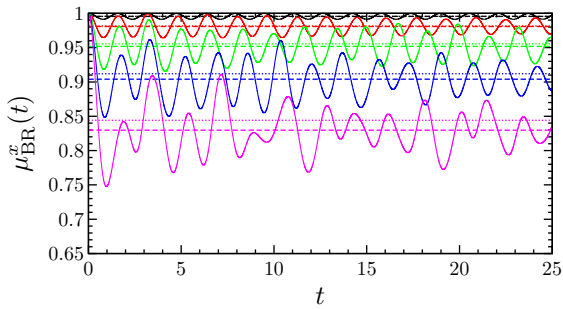
(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

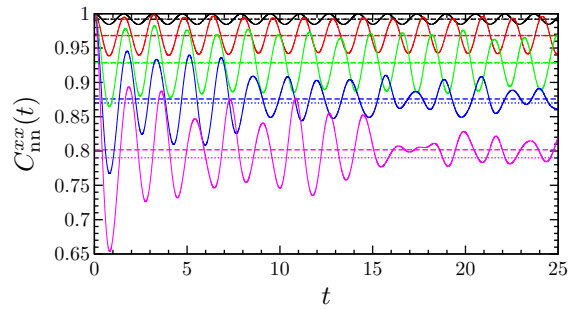
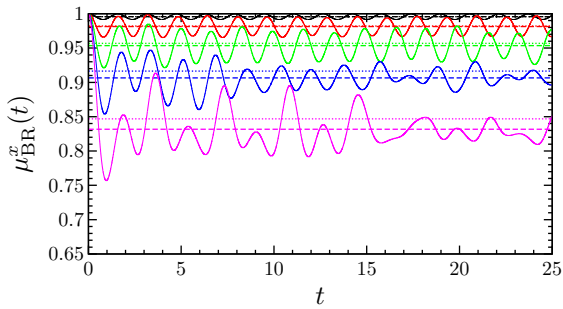
(i) $L = 4$



(ii) $L = 8$



(iii) $L = 12$



(iv) $L = 16$

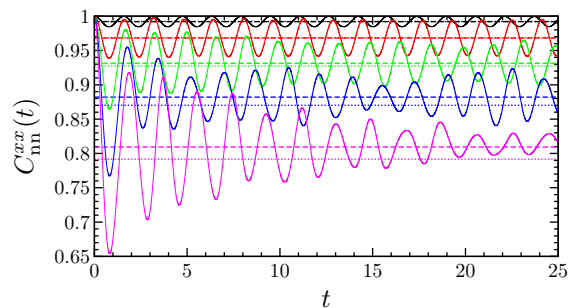
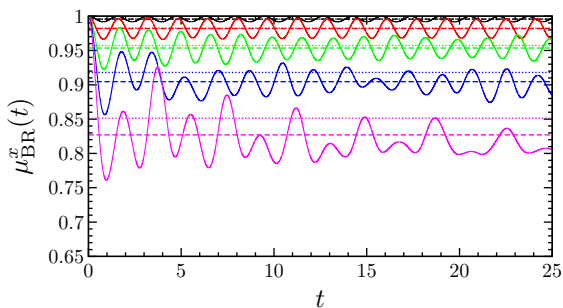


Abbildung 4.29: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Feldquenchs für die Systemgrößen (i) 4×4 , (ii) 8×8 , (iii) 12×12 und (iv) 16×16 . Der Farbcode lautet – (1, 0) \rightarrow (1, 0.25), – (1, 0) \rightarrow (1, 0.5), – (1, 0) \rightarrow (1, 0.75), – (1, 0) \rightarrow (1, 1), – (1, 0) \rightarrow (1, 1.25). Gestrichelte Linien geben die zeitlichen Mittelwerte über das Zeitintervall $[0, 25]$ an und gepunktete Linien die thermischen Erwartungswerte der Observablen im System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} .

das 4×4 -System die zeitlichen Mittelwerte nach den stärkeren Feldquenchs unterhalb der thermischen Erwartungswerte liegen, liegen sie für das 12×12 - sowie das 16×16 -System oberhalb von diesen. Die Abweichungen wachsen mit der Systemgröße für ein gegebenes Quenchprotokoll, d. h. der zeitliche Mittelwert nimmt für die betrachteten Systemgrößen im Verhältnis zum thermischen Erwartungswert mit der Systemgröße zu. Für das 8×8 -System fallen der thermische Erwartungswert und der zeitliche Mittelwert nahezu übereinander. Die thermischen Erwartungswerte sind stabil gegenüber Änderung der Systemgröße, sodass die relative Verschiebung der zeitlichen Mittelwerte und der thermischen Erwartungswerte allein auf der Änderung der zeitlichen Mittelwerte mit der Systemgröße beruht.

Zeitmittelwerte und thermische Erwartungswerte der Observablen

Nachdem im Rahmen der Betrachtungen der Zeitentwicklung des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs bereits kurz auf die Zeitmittelwerte und thermischen Erwartungswerte der Observablen eingegangen wurde, sollen diese im Folgenden genauer untersucht werden. Zu diesem Zweck sind in den Abbildungen 4.30 und 4.31 die Erwartungswerte der Observablen für das System bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur sowie die zeitlichen Mittelwerte der Observablen nach dem Quench als Funktion des Verhältnisses h/J nach dem Quench aufgetragen. Im Falle der Wechselwirkungsquenchs werden nur Quenchs mit $h/J > (h/J)_{\text{crit}}$ betrachtet, da der Vergleich zu den exakten Resultaten aus der numerischen Integration der Schrödingergleichung für das 4×4 -System gezeigt hat, dass die Genauigkeit der Approximation durch das Variations-Monte-Carlo-Verfahren unter Verwendung des Jastrowansatzes stark abnimmt, wenn sich h/J dem kritischen Punkt nähert. Für das System nach Feldquenchs hingegen wurde gezeigt, dass für Werte von $h/J < \frac{1}{2}(h/J)_{\text{crit}}$ das System die ferromagnetische Phase nicht verlässt und weiterhin eine gute Übereinstimmung der exakten Resultate und der Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens besteht.

Es werden wiederum zunächst die Wechselwirkungsquenchs betrachtet. Für diese zeigt der Verlauf der thermischen Erwartungswerte in Spalte (a) von Abbildung 4.30 ein Maximum für $h/J \approx 2$. Wie Abbildung 4.13 (a) entnommen werden kann, weist der Endpunkt dieses Wechselwirkungsquenchs im h/J - T/J -Diagramm den geringsten Abstand zum Phasenübergang in die ferromagnetische Phase auf. Mit steigendem Abstand vom Phasenübergang sowohl für kleinere als auch für größere Werte von h/J fallen sowohl die thermischen Erwartungswerte des renormierten Betrages der Magnetisierung als auch der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn ab. Während sich im Verlauf der thermischen Erwartungswerte der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nur für das 4×4 -System Abweichungen gegenüber den größeren Systemen zeigen, ist für den renormierten Betrag der Magnetisierung der bereits bei Betrachtung der Zeitentwicklung des Erwartungswertes beschriebene Einfluss der Systemgröße erkennbar. Ein Vergleich der zeitgemittelten Erwartungswerte der Observablen zu ihren thermischen Erwartungswerten zeigt für alle betrachteten Systemgrößen eine gute Übereinstimmung für große Verhältnisse h/J . Nähert sich h/J dem kritischen Punkt $(h/J)_{\text{crit}}$ an, so ergeben sich Abweichungen. Hierbei ist zu beachten, dass in diesem Bereich von h/J die Genauigkeit der Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes abnimmt. Wie im Folgenden mithilfe von Betrachtungen der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren und eines Finite-Size-Scalings der Differenz der thermischen und der zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen gezeigt werden wird, ist zu erwarten, dass diese Abweichungen im thermodynamischen Limes verschwinden.

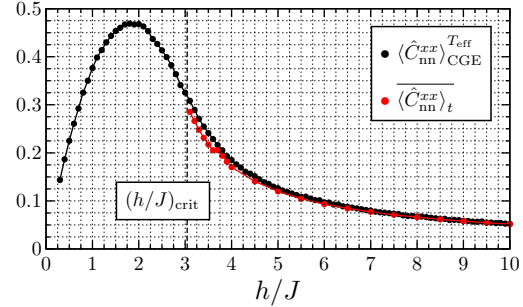
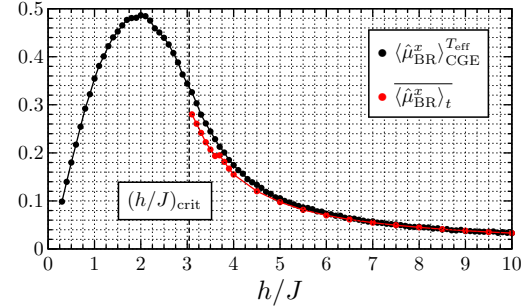
Bei der Betrachtung der thermischen sowie der zeitgemittelten Erwartungswerte der Observablen nach den Feldquenchs in Abbildung 4.31 zeigt sich für den renormierten Betrag der Magnetisierung sowohl für das System im thermischen Gleichgewicht als auch für den zeitlichen Mittelwert nach den Quenchs eine Abhängigkeit von der Systemgröße. Für die Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn ist eine solche Abhängigkeit für $h/J < (h/J)_{\text{crit}}$ nur für die Zeitmittelwerte nach den Quenchs gegeben. Die thermischen Erwartungswerte der gleichzeitigen Korrelationsfunktion hingegen sind für die Verhältnisse von h/J , für die der Vergleich zu dem System nach den Feldquenchs durchgeführt wird, von der Systemgröße unabhängig. Ein Vergleich der Abstände zwischen den zeitlichen Mittelwerten der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn für unterschiedliche Systemgrößen für ein gegebenes Verhältnis h/J zeigt, dass die Abstände zwischen den Werten für zwei aufeinanderfolgende Systemgrößen umso kleiner sind, je größer die Systemgröße ist. Es besteht somit Grund zu der Annahme, dass für noch größere Systeme der zeitliche Mittelwert des Erwartungswertes der gleichzeitigen Korrelationsfunktion

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$

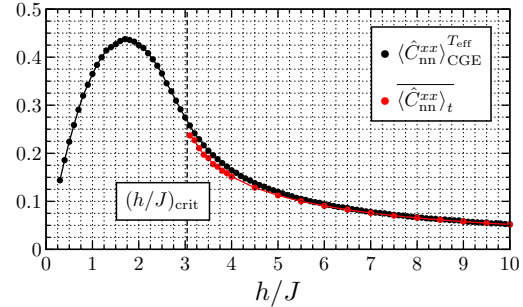
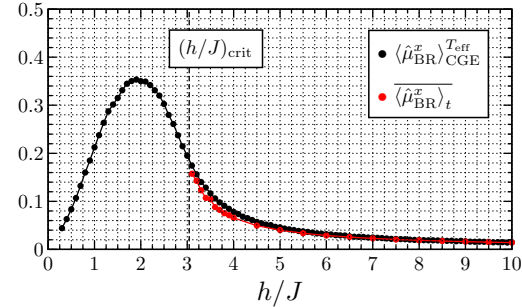
(a) Renormierter Betrag der Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

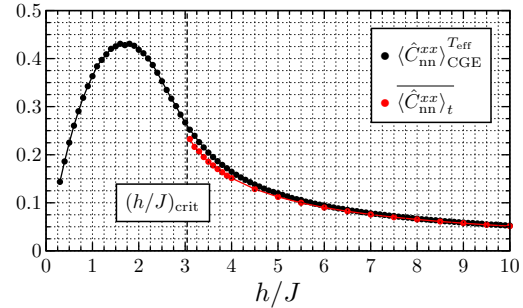
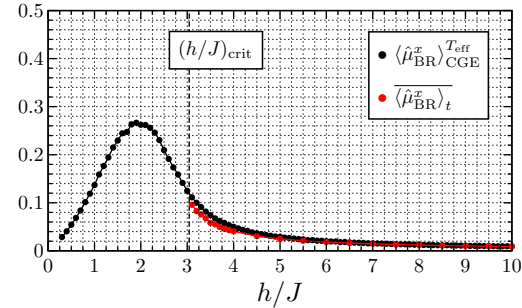
(i) $L = 4$



(ii) $L = 8$



(iii) $L = 12$



(iv) $L = 16$

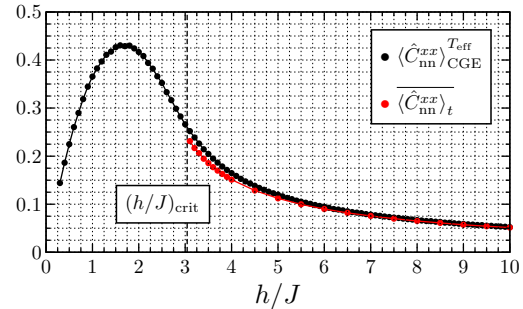
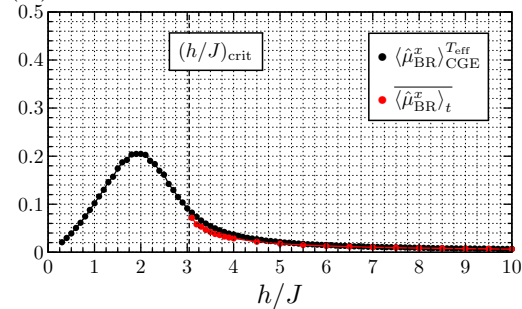


Abbildung 4.30: Vergleich des thermischen Erwartungswertes (●) und des zeitlichen Mittelwertes (●) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Wechselwirkungsquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$ für die Systemgrößen (i) 4×4 , (ii) 8×8 , (iii) 12×12 und (iv) 16×16 .

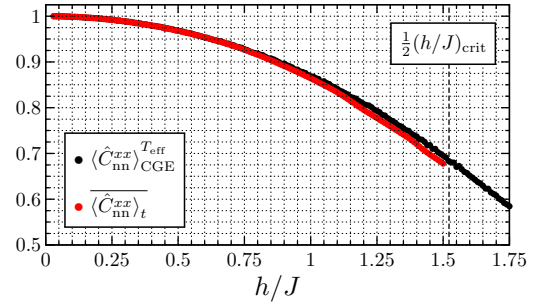
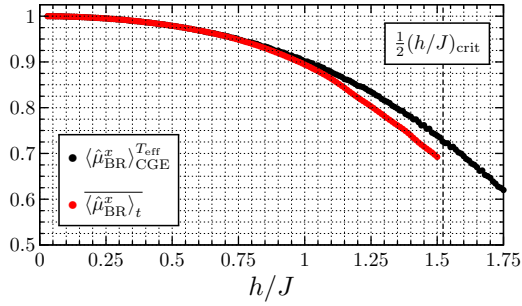
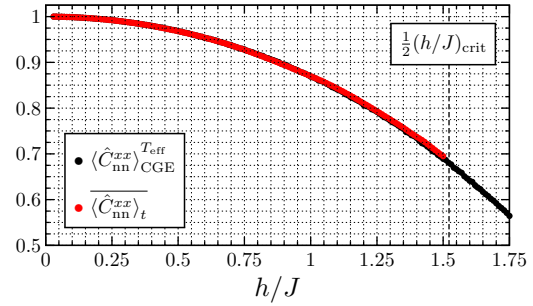
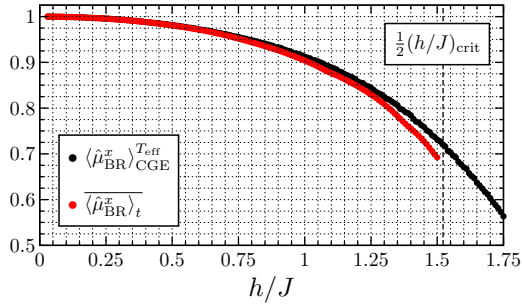
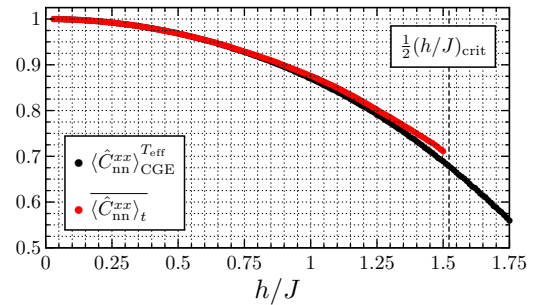
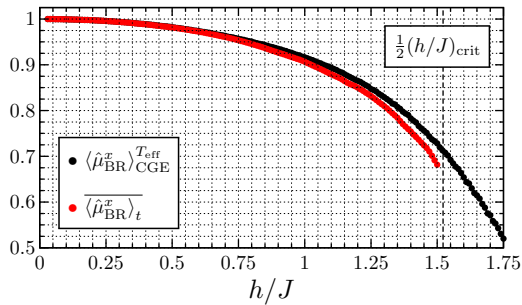
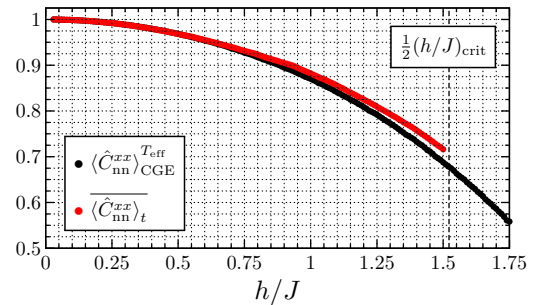
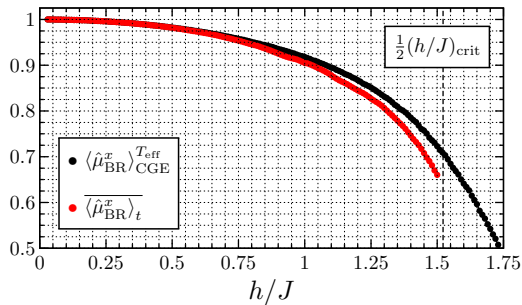
Feldquenchs ($J, 0$) \rightarrow (J, h)(a) Renormierter Betrag
der Magnetisierung(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
zwischen nächsten Nachbarn(i) $L = 4$ (ii) $L = 8$ (iii) $L = 12$ (iv) $L = 16$ 

Abbildung 4.31: Vergleich des thermischen Erwartungswertes (\bullet) und des zeitlichen Mittelwertes ($\color{red}\bullet$) (a) des renormierten Betrages der Magnetisierung und (b) der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Feldquenchs ($J, 0$) \rightarrow (J, h) für die Systemgrößen (i) 4×4 , (ii) 8×8 , (iii) 12×12 und (iv) 16×16 .

zwischen nächsten Nachbarn für jedes Verhältnis h/J gegen einen festen Wert konvergiert. Eine mögliche Erklärung dafür, dass dieser Effekt die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den Feldquenchs bestrift, besteht darin, dass ihre Summanden Zwei-Spin-Operatoren darstellen und sie dadurch stärker von Finite-Size-Effekten betroffen ist als der Betrag der Magnetisierung. Diese Finite-Size-Effekte betreffen vor allem das System außerhalb des Gleichgewichts.

Zeitgemittelte und thermische Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Der Vergleich der Erwartungswerte der Observablen für das System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur zu den zeitgemittelten Erwartungswerten nach den Quenchs hat für beide betrachteten Quenchprotokolle eine gute Übereinstimmung im Falle schwacher Quenchs sowie zunehmende Abweichungen bei Erhöhung der Quenchstärke bzw. Annäherung an den Phasenübergang ergeben. Für die Bereiche von h/J , in denen die Abweichungen bestehen, thermalisiert das System für die betrachteten Systemgrößen nicht. Für die Bereiche mit guter Übereinstimmung von Zeit- und Ensemblemittel hingegen sind noch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren für das System im thermischen Gleichgewicht mit ihren zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Quenchs zu vergleichen, um die Frage nach dem Auftreten von Thermalisierung beantworten zu können. Weiterhin gilt es zu überprüfen, ob die beobachteten Abweichungen durch Finite-Size-Effekte hervorgerufen sind und im thermodynamischen Limes verschwinden. Begonnen werde mit dem Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Die Abbildungen 4.32 bis 4.35 zeigen die thermischen sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Wechselwirkungsquenchs für die Systemgrößen 4×4 bis 16×16 . Die Verläufe der Häufigkeiten sowohl der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ als auch der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion nächster Nachbarn misst, folgen dabei dem Verlauf einer Gaußlocke. Während sich für das 4×4 -System insbesondere in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der $p(\varepsilon_n^{xx})$ noch Abweichungen von einem gaußförmigen Kurvenverlauf zeigen, ist der Verlauf ab der Systemgröße 8×8 klar erkennbar. Dieser Kurvenverlauf ist in der paramagnetischen Phase aufgrund der dort in x -Richtung nicht vorhandenen Fernordnung zu erwarten. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p(\mu_m^x)$ sind symmetrisch bzgl. null. Dies folgt aus der in der paramagnetischen Phase ungebrochenen globalen \mathbb{Z}_2 -Spin-Umklapp-Symmetrie. Die endliche Breite der Gaußkurven ist eine Folge der endlichen Systemgrößen. Mit zunehmender Systemgröße nimmt die Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilung immer weiter ab, sodass der Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung immer kleiner wird und schließlich im thermodynamischen Limes in der paramagnetischen Phase verschwindet. Dies folgt daraus, dass Fluktuationen mit der Systemgröße immer unbedeutender werden. Ein ähnliches Bild zeigt sich für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der ε_n^{xx} . Sie werden ebenfalls mit zunehmender Systemgröße schmaler. Da der Erwartungswert der gleichzeitigen Korrelationsfunktion nächster Nachbarn innerhalb der paramagnetischen Phase nur im Grenzfall $h/J \rightarrow \infty$ bzw. $T/J \rightarrow \infty$ verschwindet, sind die Gaußkurven gegenüber null verschoben. Nach dieser allgemeinen Diskussion des Verlaufs der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren werde sich nun dem Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p_{CGE}^{T_{\text{eff}}}(\mu_m^x)$ und $p_{CGE}^{T_{\text{eff}}}(\varepsilon_n^{xx})$ im thermischen System bei der Temperatur T_{eff} zu den entsprechenden zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen $\overline{p_t}(\mu_m^x)$ und $\overline{p_t}(\varepsilon_n^{xx})$ des Systems nach den Wechselwirkungsquenchs zugewandt. Für schwache Wechselwirkungsquenchs, d. h. große Verhältnisse h/J nach dem Quench, zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der thermischen und der zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sowohl von μ_m^x als auch von ε_n^{xx} . Für stärkere Wechselwirkungsquenchs, d. h. kleinere Verhältnisse von h/J nach dem Quench und damit eine größere Nähe zum Phasenübergang, ergeben sich Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Im Falle der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x ist $p_{CGE}^{T_{\text{eff}}}(\mu_m^x)$ breiter als $\overline{p_t}(\mu_m^x)$, d. h. im thermischen System gibt es stärkere Fluktuationen als im System nach dem Quench. Die Abweichungen nehmen mit kleiner werdendem h/J zu. Ein Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für ein betrachtetes Quenchprotokoll zeigt eine Verringerung der Abweichungen mit zunehmender Systemgröße. Diese Abweichungen werden im Folgenden noch in Abhängigkeit von der Systemgröße quantifiziert werden. Zunächst werden jedoch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der ε_n^{xx} untersucht. Für diese zeigen sich mit zunehmender Quenchstärke ebenfalls zunehmende Abweichungen zwischen $p_{CGE}^{T_{\text{eff}}}(\varepsilon_n^{xx})$ und $\overline{p_t}(\varepsilon_n^{xx})$. Die Abweichungen beschränken sich hierbei nicht nur auf eine unterschiedliche Breite der Gaußkurven, sondern umfassen auch eine Verschiebung ihrer Maxima. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\overline{p_t}(\varepsilon_n^{xx})$ ist breiter als die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_{CGE}^{T_{\text{eff}}}(\varepsilon_n^{xx})$ und ihr Maximum liegt bei kleineren Werten von ε_n^{xx} . Wie bei den

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$ $L = 4$

(a) Magnetisierung

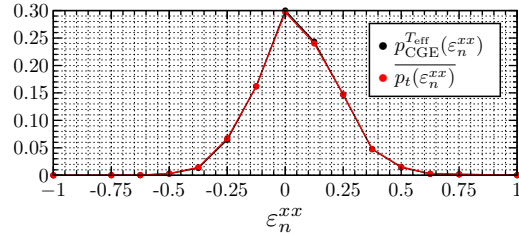
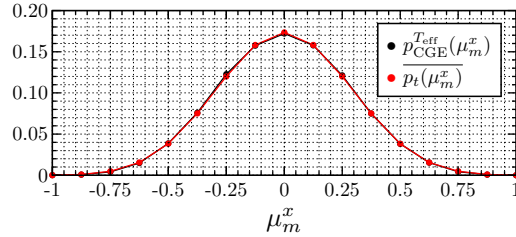
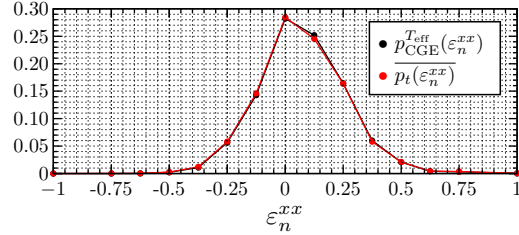
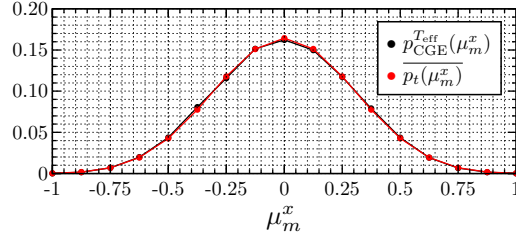
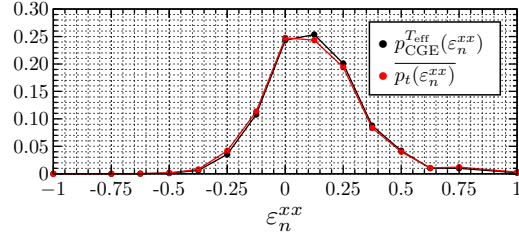
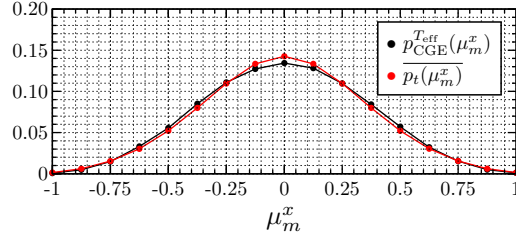
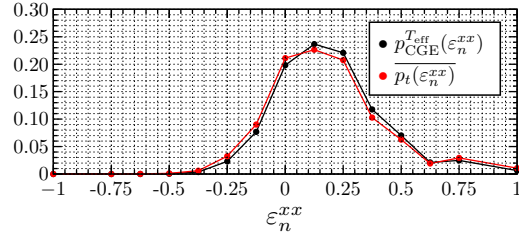
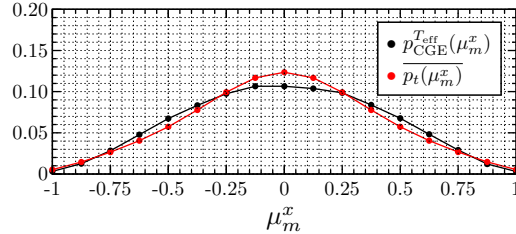
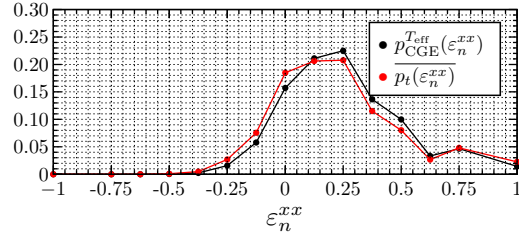
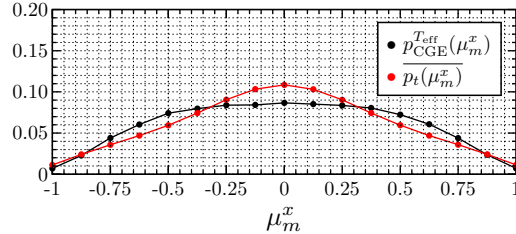
(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
zwischen nächsten Nachbarn(i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$ (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$ (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$ (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ 

Abbildung 4.32: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 4×4 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Wechselwirkungsquenchs (i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ und (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$.

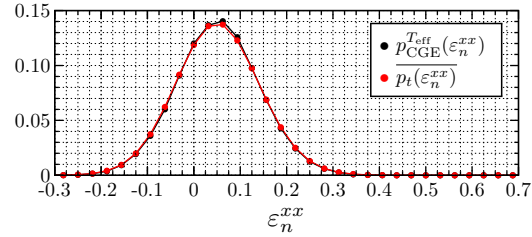
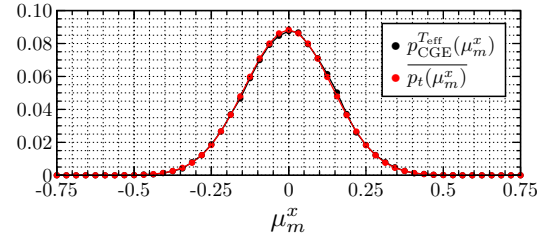
Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$

$L = 8$

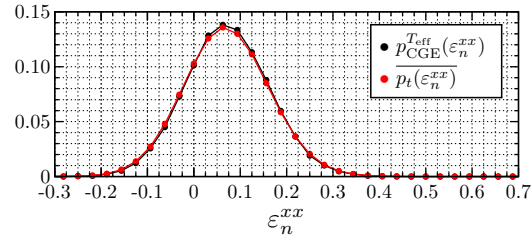
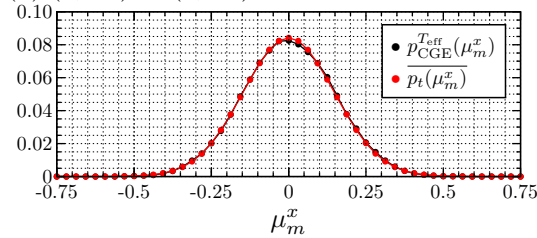
(a) Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
zwischen nächsten Nachbarn

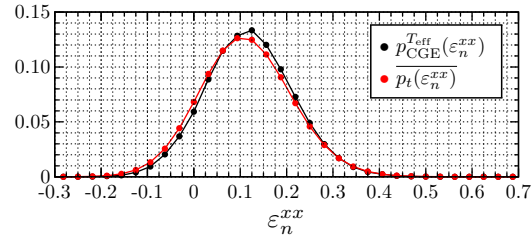
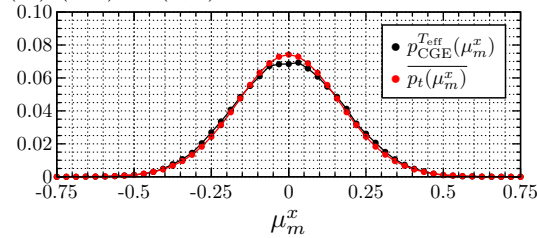
(i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$



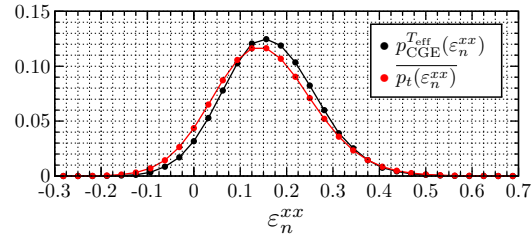
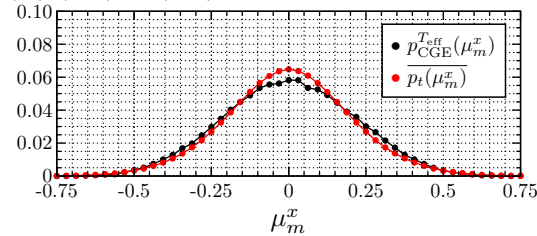
(ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$



(iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$



(iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$



(v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$

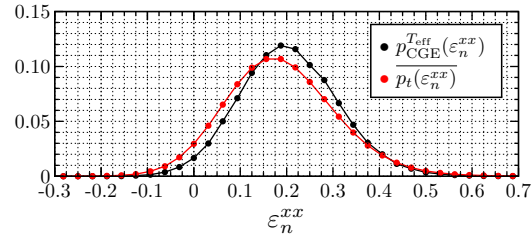
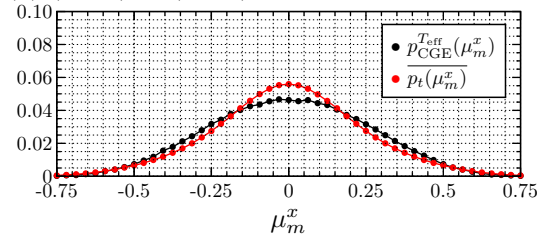
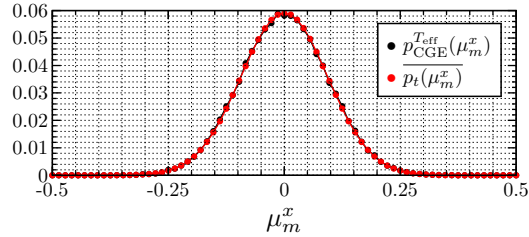
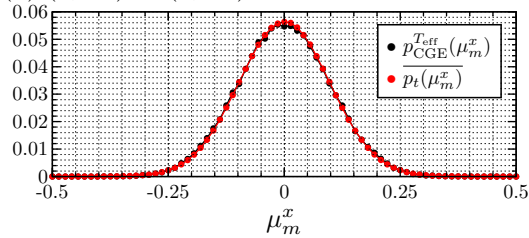
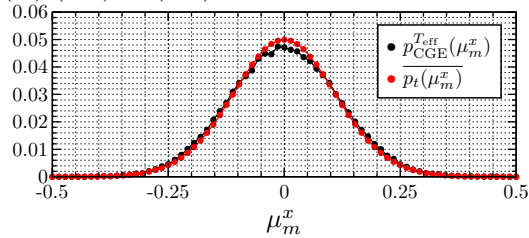
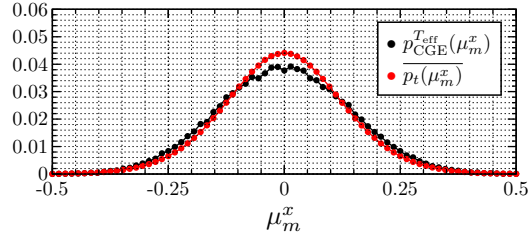
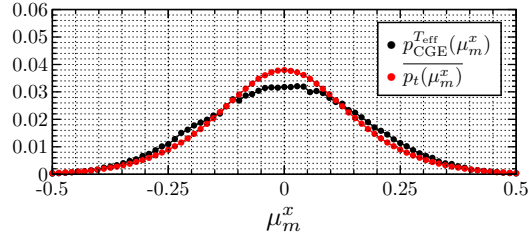


Abbildung 4.33: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 8×8 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Wechselwirkungsquenchs (i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ und (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$.

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$ $L = 12$

(a) Magnetisierung

(i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$ (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$ (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$ (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ 

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

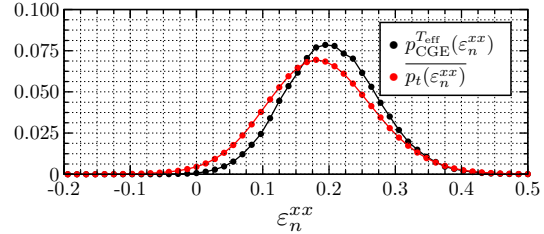
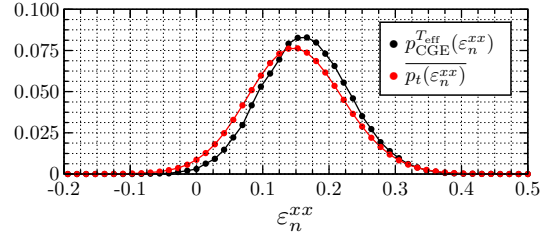
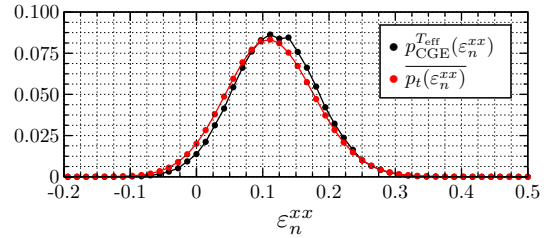
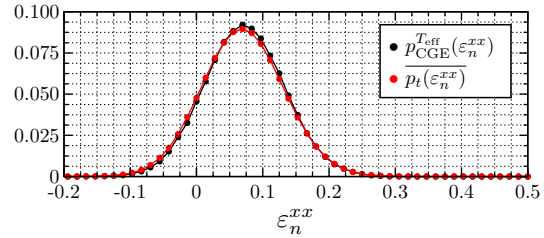
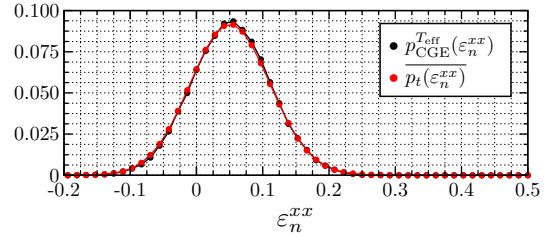


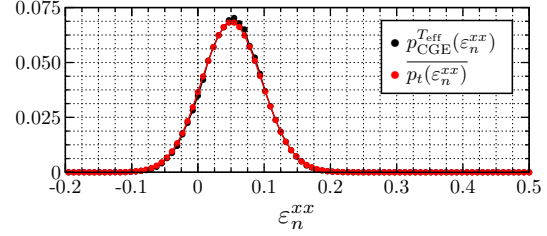
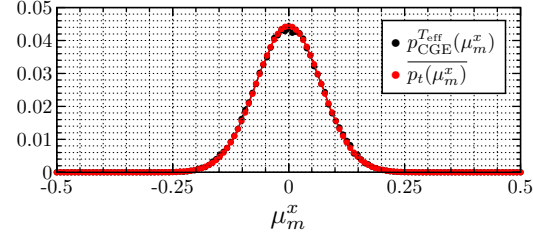
Abbildung 4.34: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 12×12 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Wechselwirkungsquenchs (i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ und (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$.

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$
 $L = 16$

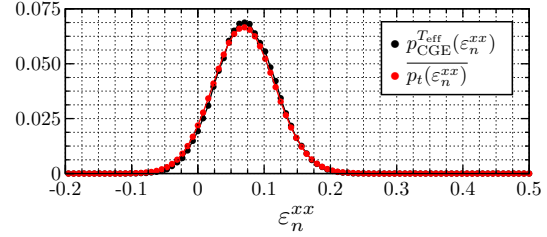
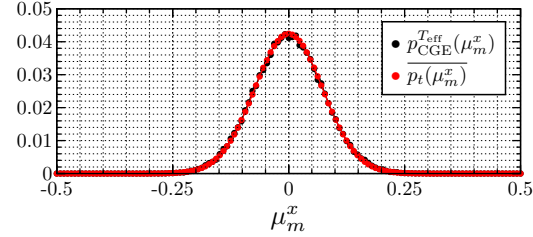
(a) Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
 zwischen nächsten Nachbarn

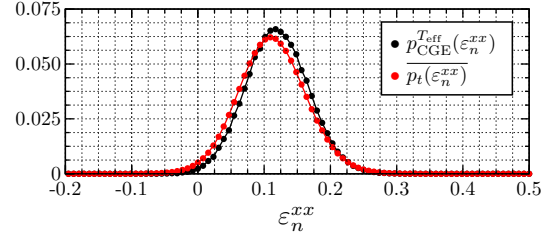
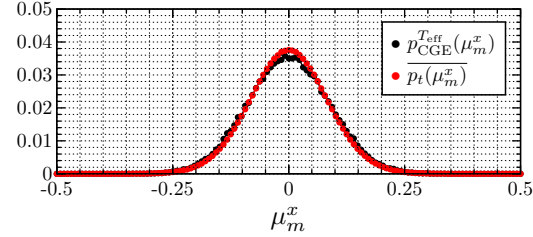
(i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$



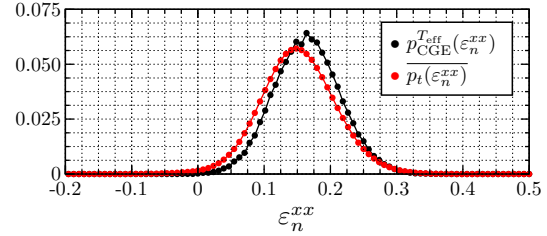
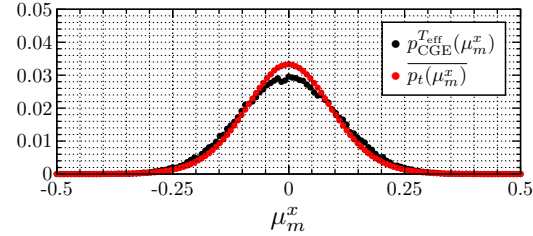
(ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$



(iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$



(iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$



(v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$

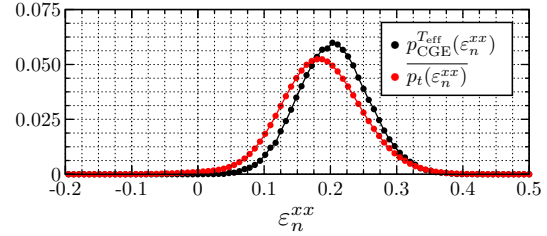
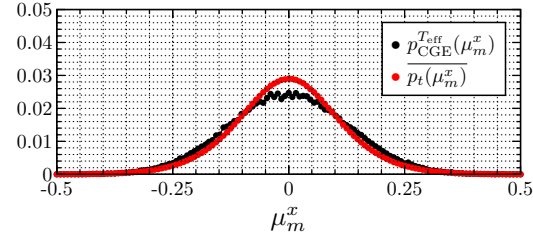


Abbildung 4.35: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 16×16 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Wechselwirkungsquenchs (i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ und (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$.

Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x zeigt sich aber auch hier eine Verringerung der Abweichungen mit zunehmender Systemgröße.

Nach den Betrachtungen sowohl der Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}}(\mu_m^x)$ und $\overline{p_t(\mu_m^x)}$ als auch $p_{\text{CGE}}^{T_{\text{eff}}}(\varepsilon_n^{xx})$ und $\overline{p_t(\varepsilon_n^{xx})}$ nach den Wechselwirkungsquenchs werde sich nun den entsprechenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Feldquenchs zugewandt. Diese sind für die Systemgrößen 4×4 bis 16×16 in den Abbildungen 4.36 bis 4.39 dargestellt. Aufgrund der endlichen Systemgrößen tritt auch in der ferromagnetischen Phase keine spontane Symmetriebrechung auf. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x sind aus diesem Grund wie nach den Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen Phase symmetrisch bzgl. null. Die Form der Wahrscheinlichkeitsverteilungen folgt dabei nicht der einer Gaußkurve, sondern weist zwei getrennte Maxima auf, die symmetrisch zu null liegen. Dies ist eine Konsequenz der innerhalb der ferromagnetischen Phase vorhandenen langreichweitigen Ordnung innerhalb des Systems. Je schwächer der Quench ist, desto näher rücken die Maxima zu $\mu_m^x = +1$ bzw. $\mu_m^x = -1$. Da Werte von μ_m^x nahe null nur mit geringer Wahrscheinlichkeit angenommen werden, ist in den Abbildungen für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x der Bereich von -0.5 bis 0.5 herausgeschnitten. Der Verlauf der $p(\varepsilon_n^{xx})$ weist ein einzelnes Maximum auf, welches umso näher bei $+1$ liegt, je schwächer der betrachtete Feldquench ist. Bei den Wahrscheinlichkeiten der ε_n^{xx} nahe bei $+1$ zeigen sich dabei starke Unterschiede der Wahrscheinlichkeiten nahe beieinander liegender Werte von ε_n^{xx} . Ursächlich hierfür ist, dass, wie bereits bei der Bestimmung der Anzahl der Variationsparameter in der Ansatzfunktion für das Variations-Monte-Carlo-Verfahren zur Beschreibung der Zeitentwicklung des Systems nach den Feldquenchs erläutert wurde, die minimale Kinkzahl im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell eine Funktion der Anzahl an Spin down darstellt. Werte von ε_n^{xx} nahe $+1$ entsprechen nach (4.14) einer kleinen Anzahl an Kinks. Eine kleine Anzahl an Kinks kann nur für eine kleine bzw. eine große Anzahl an Spin down erreicht werden. Als Beispiel werden Konfigurationen mit einer kleinen Anzahl m an Spin down und der Kinkzahl $n = 6$ oder $n = 8$ betrachtet. $n = 6$ kann nur durch Konfigurationen mit $m = 2$ Spin down realisiert werden. Diese müssen dafür nächste Nachbarn sein. Diese Konfiguration ist bedeutend unwahrscheinlicher als eine Anordnung der beiden Spin down, in der sie keine nächsten Nachbarn sind. Diese Konfigurationen entsprechen einer Kinkzahl von $n = 8$. Weitere Beiträge zur Kinkzahl $n = 8$ ergeben sich durch Konfigurationen mit $m = 3$ Spin down, die nächste Nachbarn sind, sowie Konfigurationen mit $m = 4$ in einem Quadrat angeordneten Spin down. Hieraus ergibt sich die höhere Wahrscheinlichkeit von ε_8^{xx} im Vergleich zu ε_6^{xx} . Auf die gleiche Weise können auch die anderen Unterschiede der Wahrscheinlichkeiten benachbarter Kinkzahlen erklärt werden. Dabei zeigt sich, dass die Wahrscheinlichkeiten bestimmter Kinkzahlen im thermodynamischen Limes gegen null streben, beispielsweise diejenige von $n = 6$. Je kleiner ε_n^{xx} bzw. je größer n wird, durch desto mehr unterschiedliche Gesamtzahlen m an Spin down kann sie realisiert werden. Aus diesem Grund nehmen die Schwankungen der Wahrscheinlichkeiten $p(\varepsilon_n^{xx})$ für kleinere Werte von ε_n^{xx} ab.

Nach Diskussion des allgemeinen Verlaufs der Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p(\mu_m^x)$ und $p(\varepsilon_n^{xx})$ werden im Folgenden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren für das System im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T_{eff} mit den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Feldquenchs verglichen. Wie im Falle der Wechselwirkungsquenchs zeigen sich mit der Quenchstärke und der Nähe zum Phasenübergang zunehmende Abweichungen zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sowohl für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x als auch für die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der ε_n^{xx} . Im Gegensatz zu den Wechselwirkungsquenchs handelt es sich bei diesen Abweichungen nicht nur um eine Änderung der Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilungen bzw. eine Verschiebung des Maximums, sondern auch der qualitative Verlauf der Wahrscheinlichkeitsverteilungen zeigt insbesondere bei der Betrachtung stärkerer Feldquenchs signifikante Unterschiede zu den Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht. Hierbei kommt der Systemgröße eine entscheidende Rolle zu. Für schwache Feldquenchs liegt der Erwartungswert des renormierten Betrages der Magnetisierung bzw. der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nahe bei $+1$. Dementsprechend weisen die μ_m^x mit Werten nahe $+1$ bzw. -1 sowie die ε_n^{xx} mit Werten nahe $+1$ die größten Wahrscheinlichkeiten auf. Da die Schrittweite von einem Eigenwert zum nächsten umgekehrt proportional zur Systemgröße ist, ergibt sich hieraus ein Einfluss auf den Verlauf der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte. Dies zeigt sich beispielsweise bei Betrachtung des Verlaufs von $p(\mu_m^x)$ nach dem Feldquench $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$. Während für das 4×4 -System die Wahrscheinlichkeit der positiven Eigenwerte von $\hat{\mu}^x$ monoton fällt mit kleiner werdendem μ_m^x , so ergibt sich bei Vergrößerung der Systemgröße insbesondere im Falle des Systems im thermischen Gleichgewicht deutlich ein Maximum der Wahrscheinlichkeitsverteilung für einen

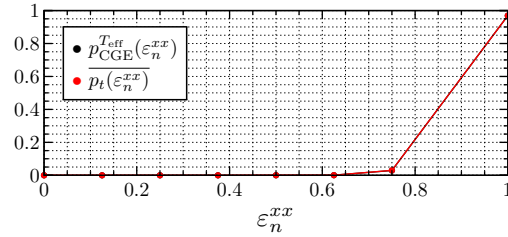
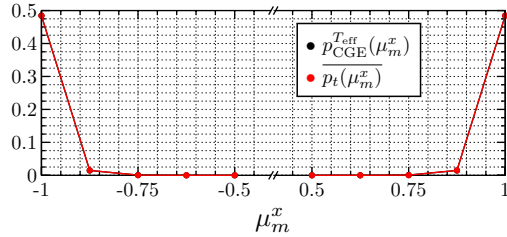
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

$L = 4$

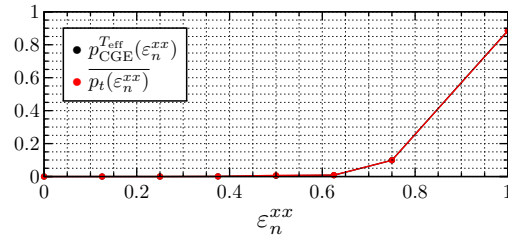
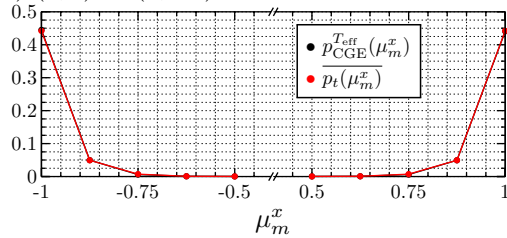
(a) Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

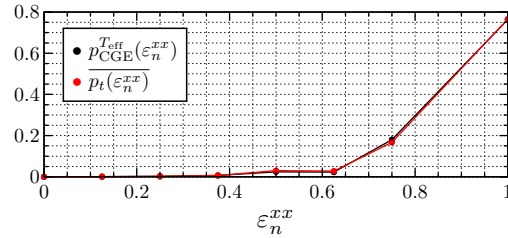
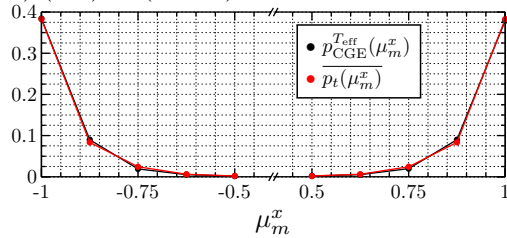
(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$



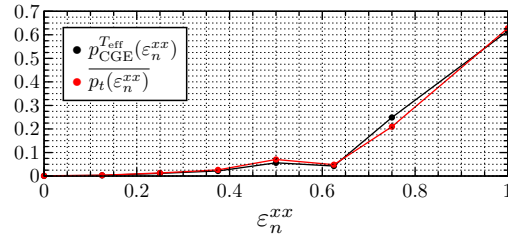
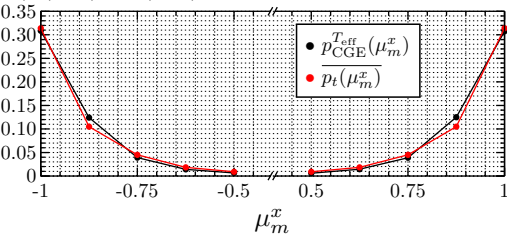
(ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$



(iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$



(iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$



(v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$

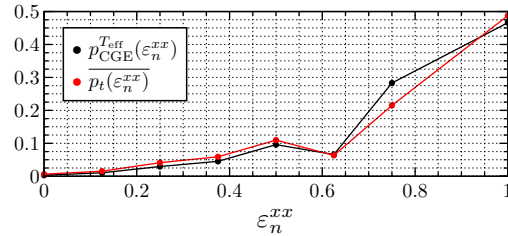
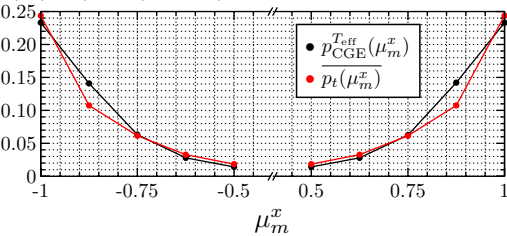


Abbildung 4.36: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 4×4 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$ $L = 8$

(a) Magnetisierung

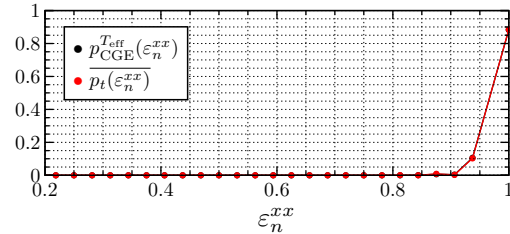
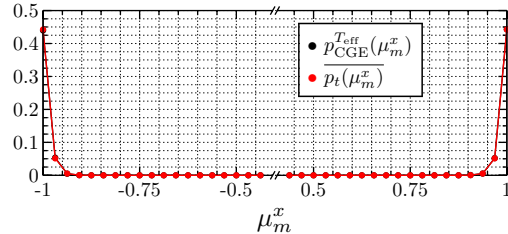
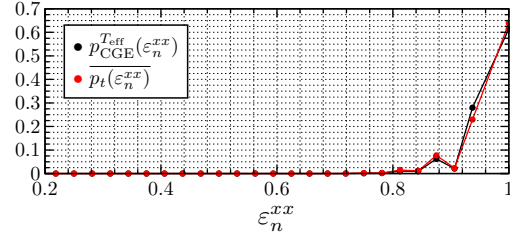
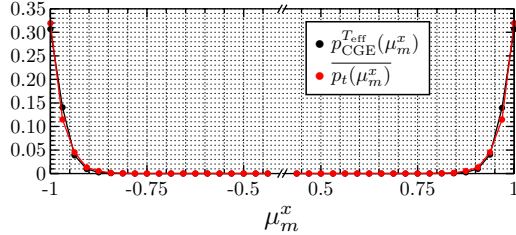
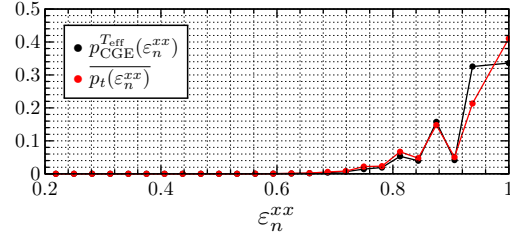
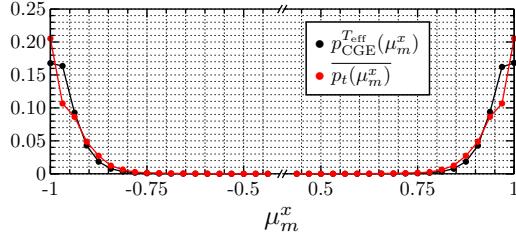
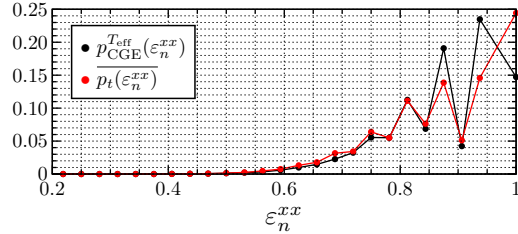
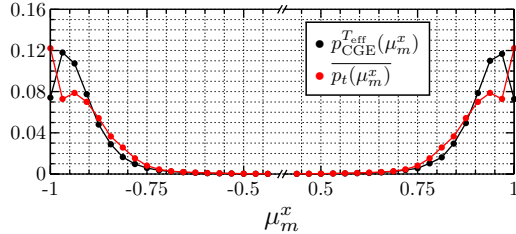
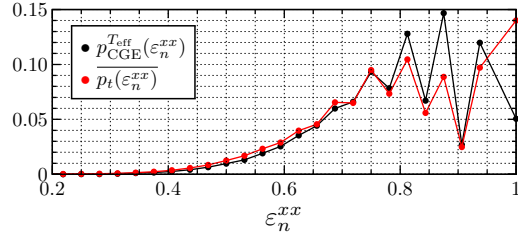
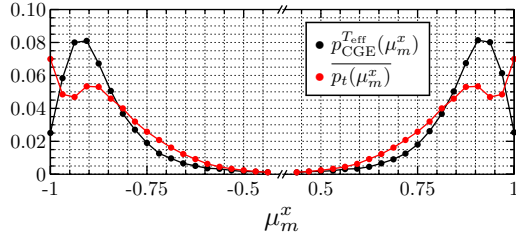
(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
zwischen nächsten Nachbarn(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$ (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$ (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ 

Abbildung 4.37: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 8×8 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

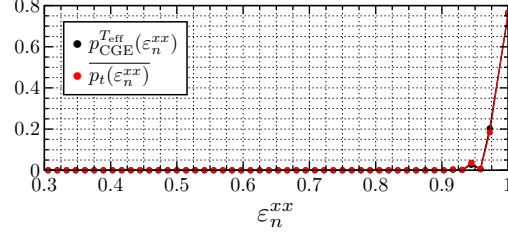
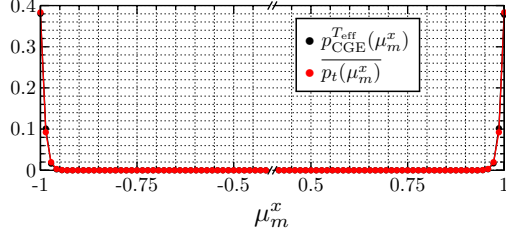
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

$L = 12$

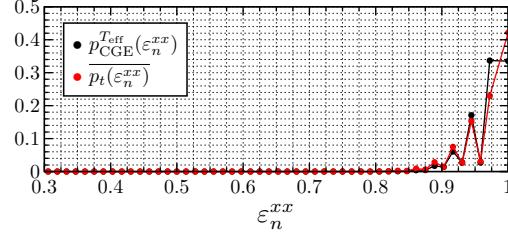
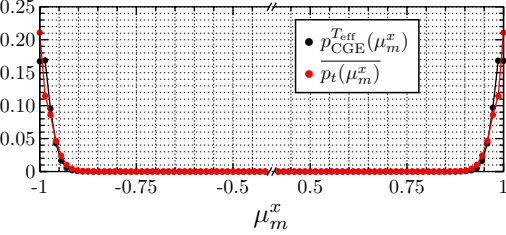
(a) Magnetisierung

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion
zwischen nächsten Nachbarn

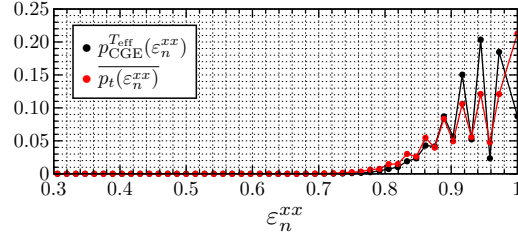
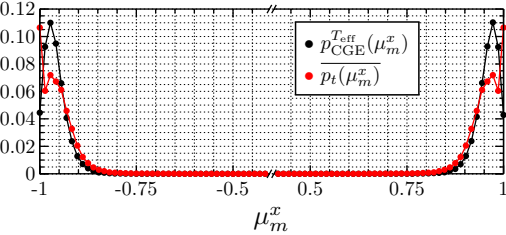
(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$



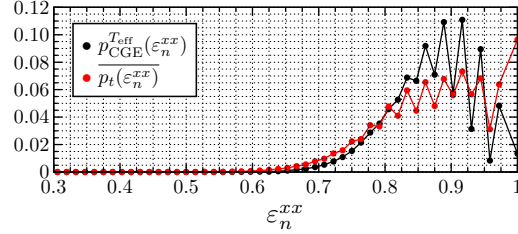
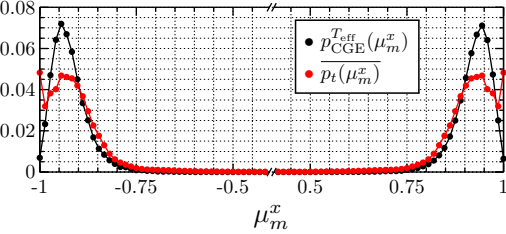
(ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$



(iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$



(iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$



(v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$

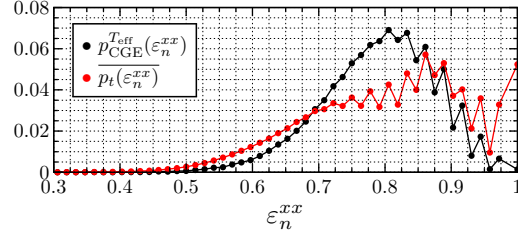
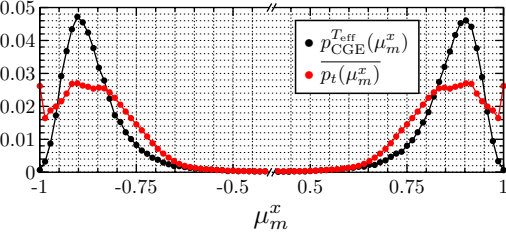
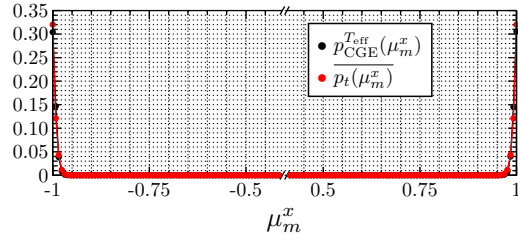
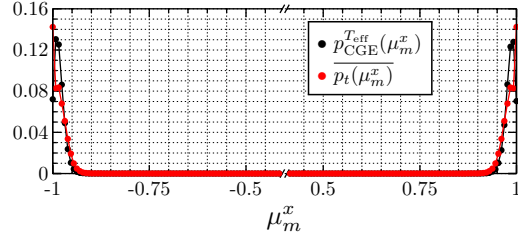
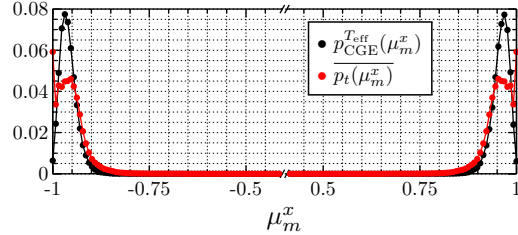
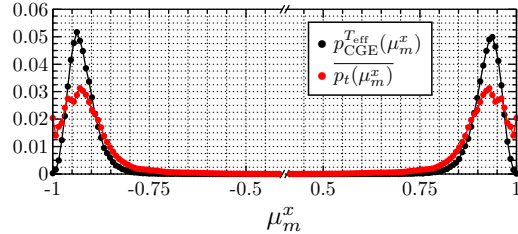
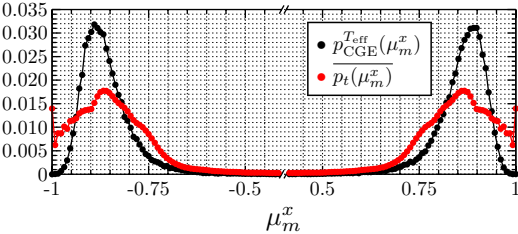


Abbildung 4.38: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 12×12 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$ $L = 16$

(a) Magnetisierung

(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$ (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$ (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ 

(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

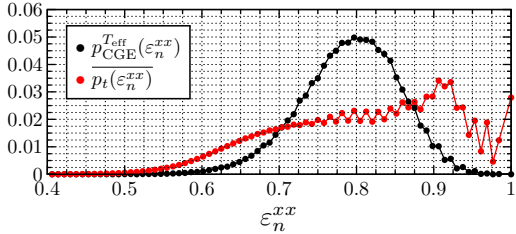
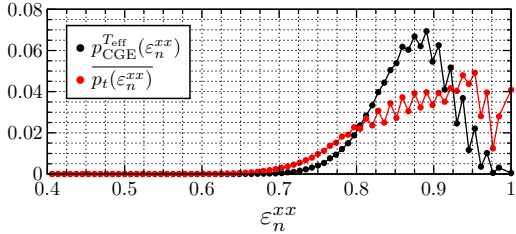
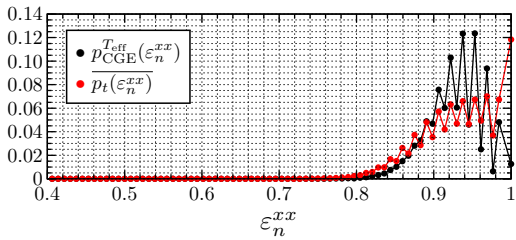
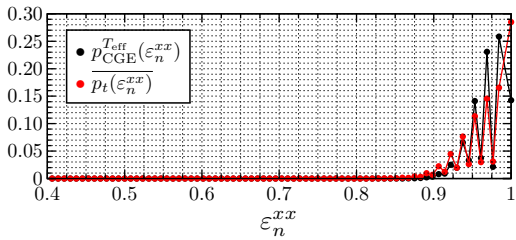
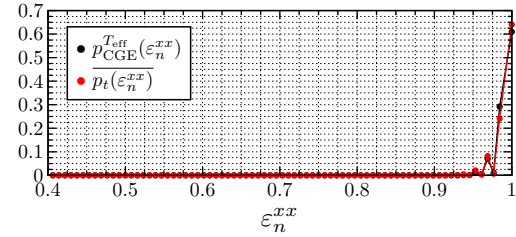


Abbildung 4.39: Wahrscheinlichkeitsverteilungen (a) der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) der Eigenwerte ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, für das 16×16 -System. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

Wert von μ_m^x kleiner als 1. Mit zunehmender Systemgröße zeichnet sich der Verlauf der Wahrscheinlichkeitsverteilung aufgrund der höheren Auflösung entlang der x -Achse bedingt durch die größere Anzahl an unterschiedlichen Eigenwerten immer feiner ab, sodass ein genauere Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das thermische System und das System nach den Quenchs möglich ist. Im Falle der Wechselwirkungsquenchs trat dieser Effekt in deutlich geringerem Ausmaß hervor, da aufgrund der in der paramagnetischen Phase nicht vorhandenen Fernordnung und der geringer ausgeprägten Nahordnung die Verläufe der Wahrscheinlichkeitsverteilungen durch Gaußkurven gegeben waren und ihre Maxima bei oder nahe bei null gelegen haben. Aus diesem Grund war auch der Verlauf der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der gleichzeitigen Korrelationsfunktion nächster Nachbarn glatt. Ein Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren zeigt nun, dass die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen breiter sind als die thermischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Dieser Beobachtung verstärkt sich mit der Quenchstärke und wird im Falle der Feldquenchs $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ sowie $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ besonders deutlich. Ein weiterer wesentlicher Unterschied zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Feldquenchs besteht darin, dass die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen eine erhöhte Wahrscheinlichkeit aufweisen, das System in einem vollständig geordneten Zustand anzutreffen, d. h. $\mu_m^x = \pm 1$ bzw. $\varepsilon_n^{xx} = +1$. Hierbei handelt es sich gerade um die Anfangskonfiguration des Systems vor dem Quench. Das System weist im zeitlichen Mittel somit eine erhöhte Wahrscheinlichkeit auf, in seiner Anfangskonfiguration angetroffen zu werden. Dies bedeutet, dass eine Erinnerung des Systems an seinen Zustand vor dem Quench besteht. Hierbei handelt es sich um einen Widerspruch zum Auftreten von Thermalisierung nach den Feldquenchs. Ein Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für verschiedene Systemgrößen zeigt keine Verminderung dieses Effektes mit der Systemgröße. Zudem bestehen bereits für relative schwache Quenchprotokolle, für die der thermische Erwartungswert und der zeitgemittelte Erwartungswert des renormierten Betrages der Magnetisierung sowie der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn in Abbildung 4.31 noch eine gute Übereinstimmung aufweisen, Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Als Beispiele hierfür können die Quenchprotokolle $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$ sowie $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$ herangezogen werden. Für eine detaillierte Betrachtung des Einflusses der Systemgröße auf die Abweichung zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sei auf das im Folgenden durchgeführte Finite-Size-Scaling verwiesen.

Finite-Size-Scaling

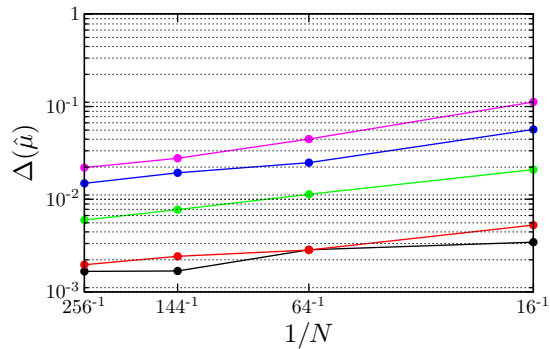
Die bisherigen Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens haben sowohl für die Wechselwirkungs- als auch für die Feldquenchs gezeigt, dass sich sowohl zwischen den zeitlichen Mittelwerten und den thermischen Erwartungswerten der Observablen als auch zwischen den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen und den thermischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren Abweichungen ergeben, die umso größer sind, je stärker der betrachtete Quench ist bzw. je näher sich das System nach dem Quench am Phasenübergang befindet. Diese Abweichungen haben sich insbesondere bei den Feldquenchs in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen gezeigt. Um einen eventuellen Einfluss der endlichen Systemgröße auf die Resultate auszuschließen, sollen nun ausgehend von den Ergebnissen für die betrachteten Systemgrößen mithilfe von Finite-Size-Scaling Rückschlüsse auf das System im thermodynamischen Limes gezogen werden. Hierzu werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der μ_m^x und ε_n^{xx} betrachtet. Zur Beschreibung der Abweichung zwischen den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen und den thermischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen wird die Größe

$$\Delta(\hat{\mathcal{O}}) = \frac{1}{N(\mathcal{O}_j)} \sum_j \frac{|\overline{p_t(\mathcal{O}_j)} - p_{\text{CGE}}^{\text{eff}}(\mathcal{O}_j)|}{p_{\text{CGE},\text{max}}^{\text{eff}}} \quad (4.133)$$

für einen Operator $\hat{\mathcal{O}}$ definiert. $N(\mathcal{O}_j)$ bezeichnet dabei die Anzahl der unterschiedlichen Eigenwerte von $\hat{\mathcal{O}}$. Diese ist für $\hat{\mu}^x$ gemäß (4.13) durch $N + 1$ und für \hat{C}_{nn}^{xx} gemäß (4.14) durch $N - 1$ gegeben. Die Normierung erfolgt in Bezug auf das Maximum $p_{\text{CGE},\text{max}}^{\text{eff}}$ der thermischen Wahrscheinlichkeitsverteilung für das betrachtete Quenchprotokoll und die betrachtete Systemgröße. In den Abbildungen 4.40 und 4.41 sind $\Delta(\hat{\mu}^x)$ und $\Delta(\hat{C}_{\text{nn}}^{xx})$ für die Wechselwirkungs- und die Feldquenchs dargestellt. Die Auftragung erfolgt dabei als Funktion der inversen Systemgröße. Der Verlauf von $\Delta(\hat{\mu}^x)$ und $\Delta(\hat{C}_{\text{nn}}^{xx})$ zeigt im Falle der Wechselwirkungsquenchs in Abbildung 4.40 eine Abnahme der Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit zunehmender Systemgröße. Es ist somit anzunehmen, dass die für die

Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$

(a) Magnetisierung



(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

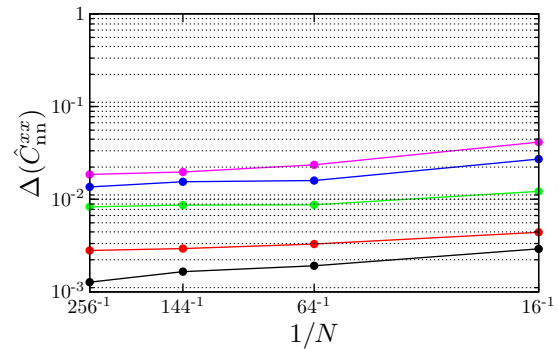
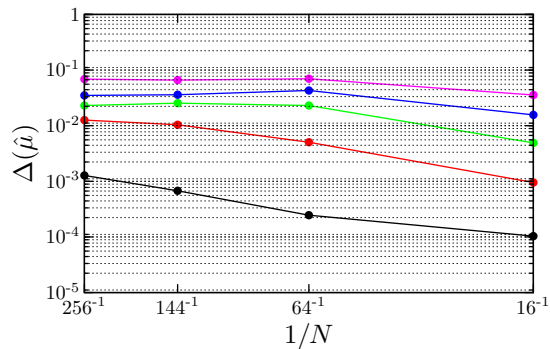


Abbildung 4.40: Abweichung zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen von (a) den Eigenwerten μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) den Eigenwerten ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, nach den Wechselwirkungsquenchs. Der Farbcode lautet \bullet $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$, \bullet $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$, \bullet $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$, \bullet $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$, \bullet $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$.

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

(a) Magnetisierung



(b) Gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn

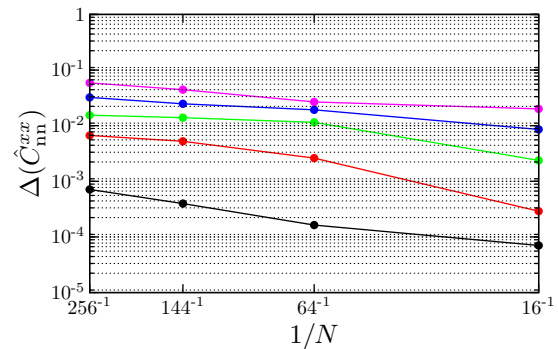


Abbildung 4.41: Abweichung zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen von (a) den Eigenwerten μ_m^x des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}^x$ und (b) den Eigenwerten ε_n^{xx} des Operators \hat{C}_{nn}^{xx} , der die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn misst, nach den Feldquenchs. Der Farbcode lautet \bullet $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, \bullet $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, \bullet $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, \bullet $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$, \bullet $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

endlichen Systemgrößen beobachteten Abweichungen im thermodynamischen Limes verschwinden und das System nach den Wechselwirkungsquenchs thermalisiert. Im Gegensatz hierzu zeigt der Verlauf von $\Delta(\hat{\mu}^x)$ und $\Delta(\hat{C}_{nn}^{xx})$ nach den Feldquenchs in Abbildung 4.41 einen Anstieg der Abweichungen mit der Systemgröße bzw. zumindest keine klare Verringerung. Es ist aus diesem Grund anzunehmen, dass das zweidimensionale transversale Ising-Modell nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase auch im thermodynamischen Limes nicht thermalisiert. Eine Diskussion dieser Resultate wird im Folgenden gegeben.

Langreichweitige Korrelationen

Vor der Diskussion der Resultate werde abschließend noch die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen weiter voneinander entfernten Spins des Systems untersucht. Wie im einleitenden Kapitel zum transversalen Ising- und XY-Modell erläutert wurde, ist in der paramagnetischen Phase ein exponentieller Abfall

der Korrelationen mit dem Abstand der Spins zu erwarten. Die Korrelationen weit voneinander entfernter Spins verschwinden somit effektiv. Aufgrund des exponentiellen Abfalls der Korrelationen wird das System als exponentiell clusternd bezeichnet. In der ferromagnetischen Phase fallen die Korrelationen zwischen den Spins ebenfalls mit steigendem Abstand ab, streben jedoch für große Abstände gegen einen konstanten, nicht verschwindenden Wert, der durch das Quadrat des Betrages der Magnetisierung gegeben ist. Der funktionale Verlauf des Abfalls für kleine Abstände ist dabei innerhalb der ferromagnetischen Phase nicht bekannt. Die Abstände der Spins werden in der Manhattan-Metrik gemessen ($r = |r_x| + |r_y|$). Zu einem betrachteten Abstand r können somit mehrere Abstandsvektoren $\mathbf{r} = (r_x, r_y)$ gehören. Insbesondere für kleinere Abstände sind zwischen diesen auch Abweichungen des Wertes der Korrelationsfunktion zu erwarten, da für diese die Gitterstruktur von größerer Bedeutung ist. Die bislang getroffenen Aussagen gelten für das System im thermischen Gleichgewicht. Es gilt nun im Folgenden zu klären, ob die zeitlichen Mittelwerte der Korrelationen des Systems nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenchs das gleiche Verhalten aufweisen. Zu diesem Zweck ist die Betrachtung möglichst großer Systeme erforderlich. Gleichzeitig ist damit jedoch insbesondere bei den Feldquenchs ein enormer rechnerischer Aufwand zur Bestimmung der Koeffizienten $C_{\mathbf{r}}(m, n)$ gemäß (4.131) verbunden, die zur Bestimmung der Zeitentwicklung des Erwartungswertes der Korrelationsfunktion zweier Spins im Abstand \mathbf{r} nach (4.132) benötigt werden. Aus diesem Grund beschränken sich die folgenden Betrachtungen auf das System der Kantenlänge $L = 12$. Für dieses sind in Abbildung 4.42 die Erwartungswerte der Korrelationsfunktion für das System im thermischen Gleichgewicht bei der effektiven Temperatur T_{eff} nach dem Quench den zeitlichen Mittelwerten der Erwartungswerte der Observablen im System nach dem Quench gegenübergestellt. Die Graphen in Spalte (a) zeigen die Resultate nach den Wechselwirkungsquenchs, die Graphen in Spalte (b) die Resultate nach den Feldquenchs. Im Falle der Wechselwirkungsquenchs weisen sowohl die thermischen Erwartungswerte als auch die zeitlichen Mittelwerte nach den Quenchs einen exponentiellen Abfall mit dem Abstand r auf, der durch Least-Square-Fits veranschaulicht wird. Für große Abstände r fallen die thermischen Erwartungswerte und die zeitlichen Mittelwerte auf null hin ab. Für kleine Abstände hingegen zeigen sich für kleine Verhältnisse h/J , die stärkeren Wechselwirkungsquenchs entsprechen, geringfügige Abweichungen zwischen den thermischen Erwartungswerten und den zeitlichen Mittelwerten. Insgesamt liegen die zeitlichen Mittelwerte für das System nach den Wechselwirkungsquenchs unterhalb der thermischen Erwartungswerte, die Korrelationen nach den Quenchs sind also schwächer ausgeprägt als im System im thermischen Gleichgewicht. Für die Feldquenchs in Spalte (b) von Abbildung 4.42 zeigen sich deutlichere Abweichungen. Die zeitlichen Mittelwerte der Korrelationen liegen wiederum unterhalb der Erwartungswerte für das System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur. Während die Abweichungen zwischen den thermischen Erwartungswerten und den zeitlichen Mittelwerten für das Quenchprotokoll $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ noch im Rahmen des numerischen Fehlers liegen, sind die Abweichungen für die stärkeren Feldquenchs signifikant. Für große Abstände r konvergieren sowohl die thermischen Erwartungswerte als auch die zeitlichen Mittelwerte der Korrelationen gegen das Quadrat des Betrages der Magnetisierung. Hieraus ergeben sich unmittelbar die Abweichungen zwischen den Korrelationen im Grenzfall großer r , da sich bereits zwischen den thermischen Erwartungswerten und den Zeitmittelwerten des renormierten Betrages der Magnetisierung in Abbildung 4.31 (a) Abweichungen gezeigt haben, die umso größer sind, je stärker der Feldquench ist bzw. je näher er das System an seinen Phasenübergang bringt. Der zeitliche Mittelwert der Korrelation zwischen nächsten Nachbarn ($r = 1$) hingegen weicht im Falle der schwachen Feldquenchs nur geringfügig vom thermischen Erwartungswert ab und liegt für die stärkeren Feldquenchs über dem thermischen Erwartungswert. Hierzu kann auch Abbildung 4.31 (b) herangezogen werden. Nach den Feldquenchs sind kurzreichweitige Korrelationen somit stärker ausgeprägt als im thermischen System, langreichweitige Korrelationen hingegen schwächer. Der Abfall der Korrelationen mit zunehmendem Abstand der betrachteten Spins unterscheidet sich infolgedessen ebenfalls. Der Abfall der zeitgemittelten Korrelationen im System nach den Feldquenchs erstreckt sich über einen weiteren Bereich als im thermischen System. Dies zeigt sich besonders deutlich bei Betrachtung der stärkeren Quenchs. Die thermischen Erwartungswerte der Korrelationen erreichen für diese bereits für einen kleineren Abstand r der beiden betrachteten Spins ihren durch das Quadrat des Betrages der Magnetisierung gegebenen Grenzwert. Insgesamt ergeben sich nach den Feldquenchs somit wesentliche Abweichungen im Verlauf der Korrelationen der Spins als Funktion des Abstandes r zwischen dem System im thermischen Gleichgewicht und dem System nach den Feldquenchs.

Korrelationsfunktion zwischen weiter voneinander entfernter Spins des Systems

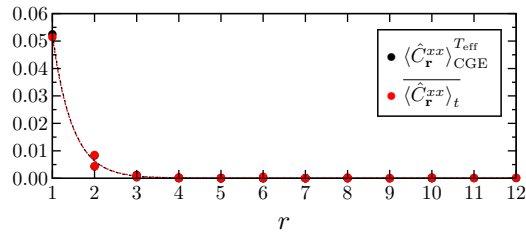
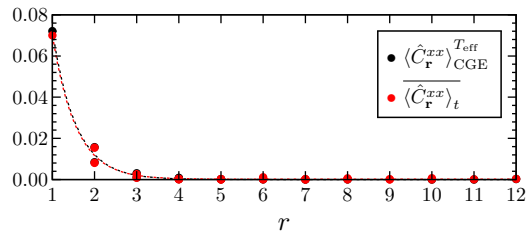
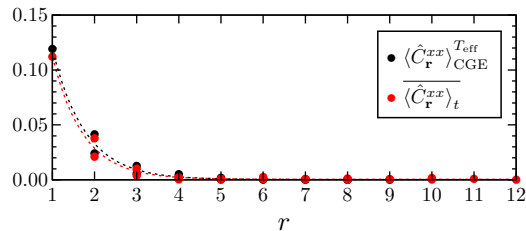
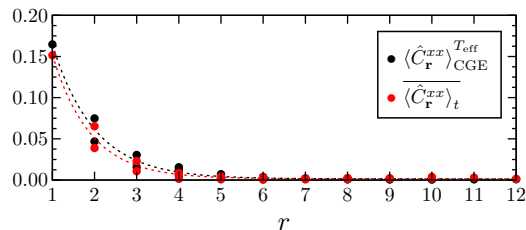
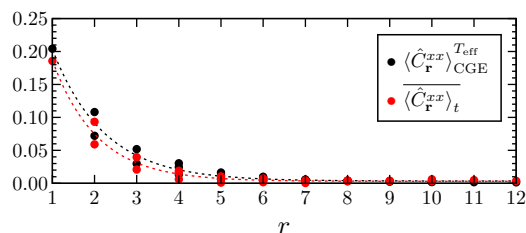
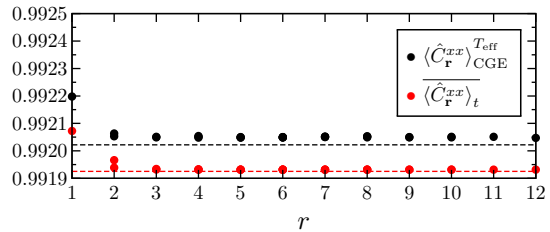
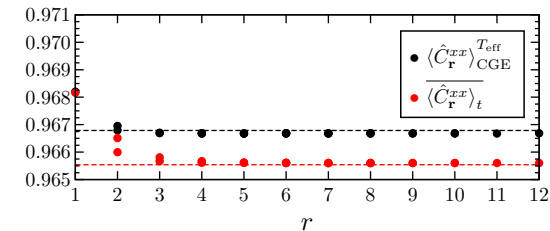
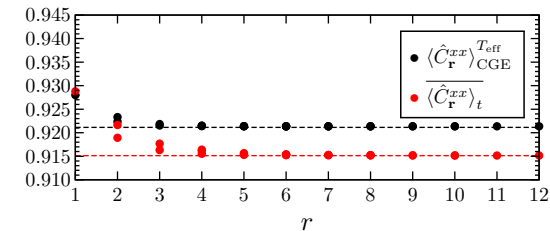
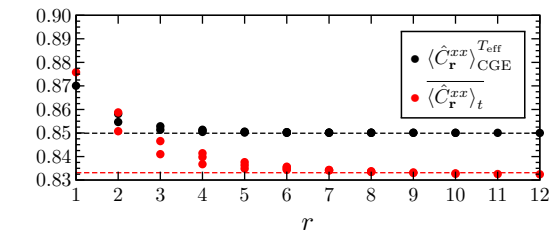
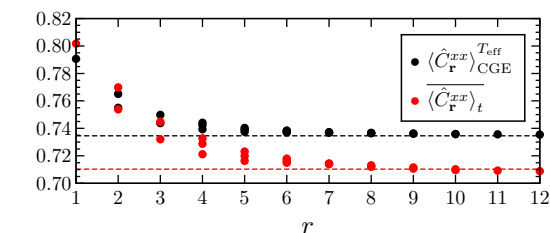
 $L = 12$ (a) Wechselwirkungsquenchs $(0, h) \rightarrow (J, h)$ (i) $(0, 10) \rightarrow (1, 10)$ (ii) $(0, 7.5) \rightarrow (1, 7.5)$ (iii) $(0, 5) \rightarrow (1, 5)$ (iv) $(0, 4) \rightarrow (1, 4)$ (v) $(0, 3.5) \rightarrow (1, 3.5)$ (b) Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$ (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$ (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$ (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ 

Abbildung 4.42: Vergleich des thermischen Erwartungswertes bei T_{eff} (\bullet) und des zeitlichen Mittelwertes (\bullet) der Korrelationsfunktion zwischen Spins im Abstand $r = |r_x| + |r_y|$ nach (a) den Wechselwirkungsquenchs und (b) den Feldquenchs für das 12×12 -System. In der paramagnetischen Phase zeigen die Korrelationen einen exponentiellen Abfall mit dem Abstand der Spins. Dies ist nach den Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen Phase durch Least-Square-Fits mit $a \cdot e^{br}$ veranschaulicht (gestrichelte Kurven). In der ferromagnetischen Phase fallen die Korrelationen für große Abstände hin zu einem endlichen Wert ab, der durch das Quadrat des Betrages der Magnetisierung gegeben ist. Dieser ist in den Graphen durch die gestrichelte Linien veranschaulicht.

Diskussion

Die Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell auf Grundlage der Bestimmung der Zeitentwicklung des Erwartungswertes verschiedener Observablen des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens haben für die betrachteten endlichen Systemgrößen sowohl nach den Wechselwirkungs- als auch nach den Feldquenchs Abweichungen zwischen den Erwartungswerten der Observablen für das System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur und den zeitgemittelten Erwartungswerten der unitären Zeitentwicklung nach dem Quench ergeben. Während sich für schwache Wechselwirkungsquenchs (h/J groß) und schwache Feldquenchs (h/J klein) eine gute Übereinstimmung der Zeitmittelwerte und der Ensemblemittelwerte gezeigt hat, haben die Abweichungen mit der Stärke des Quenchs bzw. der Nähe des Endpunktes des Quenchs zum Phasenübergang zugenommen und sich insbesondere bei den Feldquenchs deutlich in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren gezeigt. Für diese konnten signifikante Abweichungen bereits für Quenchstärken festgestellt werden, für die die thermischen Erwartungswerte und die zeitlichen Mittelwerte der Observablen noch eine gute Übereinstimmung aufgewiesen haben. Mithilfe von Finite-Size-Scaling wurde gezeigt, dass die Abweichungen zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen im Falle der Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen Phase mit der Systemgröße abnehmen und infolgedessen anzunehmen ist, dass sie im thermodynamischen Limes verschwinden und die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren für das System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Wechselwirkungsquench zugeschriebenen effektiven Temperatur mit den zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach den Wechselwirkungsquenchs zusammenfallen. Für die Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase hingegen wurde eine Zunahme bzw. zumindest keine Abnahme der Abweichungen mit der Systemgröße beobachtet, sodass davon auszugehen ist, dass das System in der ferromagnetischen Phase auch im thermodynamischen Limes nicht thermalisieren wird. Es gilt nun, diese Erkenntnisse im Kontext der bisherigen Resultate zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell zu betrachten. Die Studien von Mondaini *et al.* in [171] auf Grundlage der ETH haben ergeben, dass für nicht verschwindende und nicht zu starke Transversalfelder im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell Thermalisierung zu erwarten ist. Dabei wurden Indikatoren für das Auftreten von Quantenchaos und Eigenstate Thermalization jedoch auch für $h/J < (h/J)_{\text{crit}}$ nur in dem Teil des Spektrums des Hamiltonoperators beobachtet, der zur paramagnetischen Phase gehört. Infolgedessen kann aus der ETH eine Aussage zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell nur in der paramagnetischen gewonnen werden und auch hier nur für bestimmte Stärken des Transversalfeldes. Für das Theorem von Doyon aus [185] konnte gezeigt werden, dass seine Voraussetzungen in der paramagnetischen Phase erfüllt sind. Aufgrund der Nichtintegrabilität des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells sagt es in dieser im thermodynamischen Limes somit Thermalisierung voraus. In der ferromagnetischen Phase hingegen erlaubt auch das Theorem von Doyon keine Aussage. Da die ETH lediglich eine hinreichende aber keine notwendige Bedingung für das Auftreten von Thermalisierung ist, stehen ihre Vorhersagen und die des Theorems von Doyon somit im Einklang mit den Ergebnissen des Finite-Size-Scalings der Resultate der Zeitentwicklung des Systems mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens. Die Resultate für das System in der ferromagnetischen Phase nach den Feldquenchs hingegen stellen neue Erkenntnisse dar, da die Aussagen der ETH sich auf die paramagnetische Phase beschränken und das Theorem von Doyon in der ferromagnetischen Phase nicht angewendet werden kann. Eine genaue Erklärung für das unterschiedliche Verhalten des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen und nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase steht zwar noch aus, es ist jedoch zu vermuten, dass die in der ferromagnetischen Phase vorhandene langreichweitige Ordnung für das Ausbleiben von Thermalisierung verantwortlich ist.

4.9 Relaxationsprozess in Subsystemen

Die bisherigen Betrachtungen haben sich mit Observablen auf dem Gesamtsystems beschäftigt, bei deren Operatoren es sich um Summen lokaler Operatoren gehandelt hat. Wie in dem einleitenden Kapitel zur Nichtgleichgewichtsdynamik erläutert wurde, bleibt der reine Zustand, in dem das System vor dem Quench präpariert wurde, unter der unitären Zeitentwicklung nach dem Quench für alle Zeiten ein reiner Zustand. Die Dichtematrix des Systems zu einem beliebigen Zustand kann also nie mit der Dichtematrix eines thermischen Zustandes übereinstimmen, da es sich bei diesem um einen gemischten Zustand handelt. Aus diesem Grund wurden Zeitmittel nach dem Quench mit den thermischen Erwartungswerten verglichen. Werden hingegen Subsysteme betrachtet, so wirkt das restliche System wie ein Bad und der Zustand des Subsystems kann im Limes $t \rightarrow \infty$ ein gemischter Zustand und die reduzierte Dichtematrix des Subsystems thermisch werden [161]. Damit einher geht das Verschwinden von Fluktuationen von Observablen auf dem Subsystem um ihren Zeitmittelwert. Voraussetzung hierfür ist wiederum die Bildung des thermodynamischen Limes. In diesem gilt für die Größe N des Gesamtsystems $N \rightarrow \infty$, während die Größe N_{Sub} des Subsystems konstant bleibt. Fagotti und Essler konnten in [247] auf diese Weise für das eindimensionale transversale Ising-Modell mit periodischen Randbedingungen zeigen, dass die reduzierte Dichtematrix eines Subsystems der Länge ℓ der Kette im Limes $t \rightarrow \infty$ gegen die reduzierte Dichtematrix des Subsystems gemäß dem verallgemeinerten Gibbs-Ensemble strebt:

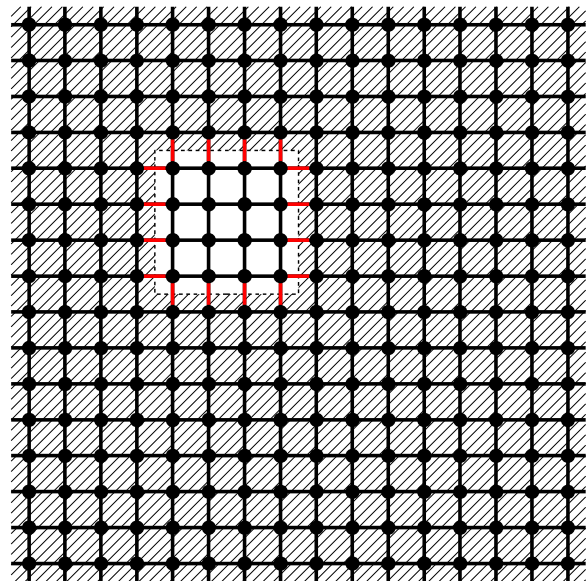
$$\lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\rho}_\ell(t) = \hat{\rho}_{\text{GGE},\ell} . \quad (4.134)$$

Für das zweidimensionale transversale Ising-Modell sind analoge Überlegungen zu denjenigen von Fagotti und Essler in [247] aufgrund der Nichtintegrabilität des Systems nicht möglich, sodass wie für das Gesamtsystem numerische Berechnungen erforderlich sind, die wiederum auf dem beschriebenen Variations-Monte-Carlo-Verfahren beruhen. Die Bestimmung von Observablen im Subsystem wird im Folgenden sowohl für das System nach den Wechselwirkungs- als auch nach den Feldquenches erläutert. Das Subsystem wird dabei wie das Gesamtsystem quadratisch gewählt mit Kantenlänge L_{Sub} und umfasst somit $N_{\text{Sub}} = L_{\text{Sub}}^2$ Spins. Formal wird das System in das Subsystem, das Bad und einen Wechselwirkungsanteil zwischen dem Subsystem und dem Bad unterteilt:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{Sub}} + \hat{H}_{\text{Bad}} + \hat{H}_{\text{WW-Sub-Bad}} . \quad (4.135)$$

\hat{H}_{Sub} ist der Hamiltonoperator des Subsystems. Er entspricht dem Hamiltonoperator eines freien Systems der entsprechende Größe mit freien Randbedingungen. Die Position des Subsystems innerhalb des Gesamtsystems kann aufgrund der Homogenität des Systems, der periodischen Randbedingungen und der globalen Quenches frei gewählt werden. Die beschriebene Unterteilung des Systems ist in Abbildung 4.43 veranschaulicht.

Abbildung 4.43: Unterteilung des Gesamtsystems in das Subsystem (weiß hinterlegt), das Bad (schraffierte Fläche) und die Wechselwirkung zwischen Subsystem und Bad (rote Kopplungen). Exemplarisch ist ein 4×4 -Subsystem des 16×16 -Systems dargestellt. Während das Subsystem und das Bad sowohl Spins als auch Kopplungen umfassen, besteht der Wechselwirkungsterm zwischen dem Subsystem und dem Bad ausschließlich aus Kopplungen.



Bei der Betrachtung von Subsystemen ist dann eine Änderung der Zeitmittelwerte der Observablen gegenüber einem isolierten System der gleichen Größe zu erwarten, wenn sich das System nach dem Quench nahe am Phasenübergang befindet und die Korrelationslänge in der Größenordnung des Subsystems liegt. Zudem ist mit einer Reduzierung der Fluktuationen um den Mittelwert zu rechnen, wenn das das Bad bildende restliche System vergrößert wird.

Wechselwirkungsquenchs

Zunächst werden Wechselwirkungsquenchs betrachtet. Das Verfahren zur Beschreibung des Relaxationsprozesses von Observablen in Subsystemen des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells nach den Wechselwirkungsquenchs mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung des Jastrowansatzes erschließt sich unmittelbar. Während des Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus zur Bestimmung der zeitabhängigen Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter werden die Messungen für die zu bestimmenden Observablen einfach für das betrachtete Subsystem ausgeführt. Die Genauigkeit der Resultate kann dabei durch Mittelung über unterschiedliche Subsysteme verbessert werden. Da nach den Wechselwirkungsquenchs in der paramagnetischen Phase bereits für das Gesamtsystem Thermalisierung beobachtet wurde, soll hierauf im Folgenden nicht näher eingegangen werden.

Feldquenchs

Die Bestimmung der Zeitentwicklung von Observablen in Subsystemen nach den Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase mithilfe des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens gestaltet sich aufgrund der für diese gewählten Variationswellenfunktion schwieriger im Vergleich zu den Wechselwirkungsquenchs. Als Observable wird hierbei zum einen wie bereits für ein isoliertes System der renormierte Betrag der Magnetisierung betrachtet. Zum anderen wird dargelegt, wie der Erwartungswert der Energie in einem Subsystem bestimmt werden kann. Dieser ist im Gegensatz zur Gesamtenergie innerhalb des Systems nicht erhalten. Zur Bestimmung der erstgenannten Observable wird im Subsystem die Kenntnis der Wahrscheinlichkeit einer gegebenen Anzahl an Spin down innerhalb des Subsystems in Abhängigkeit von der Gesamtzahl an Spin down sowie der Gesamtzahl an Kinks innerhalb des Systems erforderlich sein. Für den Erwartungswert der Energie innerhalb des Subsystems wird gezeigt werden, dass er durch die Anzahl an Kinks entlang des Randes des Subsystems bestimmt ist. Die Wahrscheinlichkeit der verschiedenen möglichen Kinkzahlen ist wiederum in Abhängigkeit von der Gesamtzahl an Spin down sowie der Gesamtzahl an Kinks innerhalb des Systems mithilfe des in Anhang E beschriebenen Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung von Rare Event Sampling zu bestimmen.

Renormierter Betrag der Magnetisierung

Es werde zunächst der renormierte Betrag der Magnetisierung innerhalb eines Subsystems betrachtet. Bezeichne m_{Sub} die Anzahl an Spin down im Subsystem und $N_{m_{\text{Sub}}|m,n}$ die Anzahl an Konfigurationen mit m_{Sub} Spin down im Subsystem, wenn das Gesamtsystem m Spin down und n Kinks enthält. Für m_{Sub} gilt

$$\min \{0, m - (N - N_{\text{Sub}})\} \leq m_{\text{Sub}} \leq \min \{N_{\text{Sub}}, m\} \quad (4.136)$$

und es ist

$$\sum_{m_{\text{Sub}}=0}^{N_{\text{Sub}}} N_{m_{\text{Sub}}|m,n} = N_{m,n} \quad (4.137)$$

Die Werte der $N_{m_{\text{Sub}}|m,n}$ werden mithilfe des Monte-Carlo-Verfahrens ermittelt, welches auch für die $N_{m,n}$ und der $T_{m,n;m',n'}$ verwendet wird.

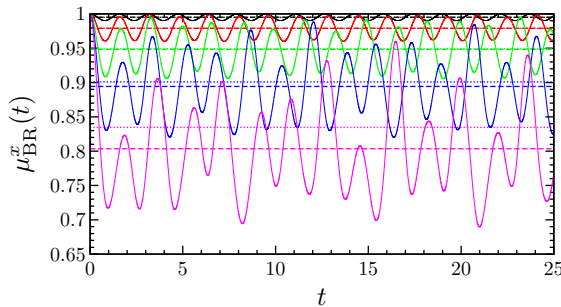
Zur Bestimmung der Zeitentwicklung der Erwartungswerte der Observablen im Subsystem ist die Zeitentwicklung des Gesamtsystems erforderlich, es sind also nach den Feldquenchs die Bewegungsgleichungen (4.125) zu lösen. Aus den zeitabhängigen Variationsparametern $\alpha_{m,n}(t)$ ergibt sich die Zeitentwicklung des Erwartungswertes des Betrages der Magnetisierung des Subsystems gemäß

$$\mu_{\text{B,Sub}}^x(t) = \langle \hat{\mu}_{\text{B,Sub}}^x \rangle_t = \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \sum_{m_{\text{Sub}}} \frac{N_{m_{\text{Sub}}|m,n}}{N_{m,n}} |\mu_{\text{Sub},m_{\text{Sub}}}^x| \quad (4.138)$$

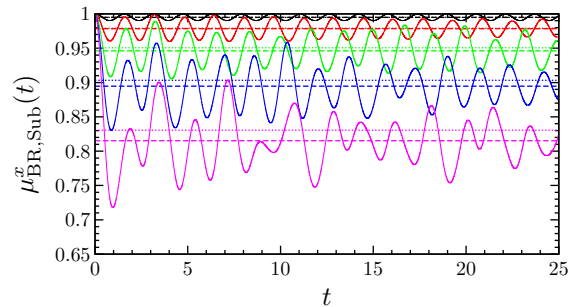
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Renormierter Betrag der Magnetisierung

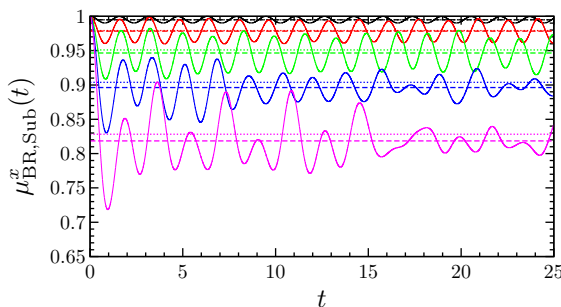
(a) 4×4 -System isoliert



(b) 4×4 -Subsystem des 8×8 -Systems



(c) 4×4 -Subsystem des 12×12 -Systems



(d) 4×4 -Subsystem des 16×16 -Systems

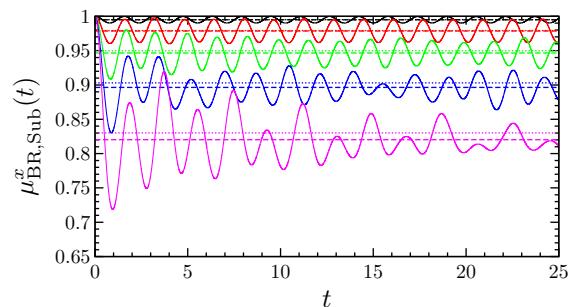


Abbildung 4.44: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung (a) im isolierten 4×4 -System sowie in einem 4×4 -Subsystem des (b) 8×8 -, (c) 12×12 - und (d) 16×16 -Systems nach den Feldquenchs. Der Farbcode lautet – (1, 0) \rightarrow (1, 0.25), – (1, 0) \rightarrow (1, 0.5), – (1, 0) \rightarrow (1, 0.75), – (1, 0) \rightarrow (1, 1), – (1, 0) \rightarrow (1, 1.25). Gestrichelte Linien geben die zeitlichen Mittelwerte über das Zeitintervall $[0, 25]$ an und gepunktete Linien die thermischen Erwartungswerte der Observablen im System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} .

Dabei sind die $\mu_{\text{Sub}, m_{\text{Sub}}}^x$ die Eigenwerte des Magnetisierungsoperators $\hat{\mu}_{\text{Sub}}^x$ des Subsystems mit

$$\mu_{\text{Sub}, m_{\text{Sub}}}^x = \frac{N_{\text{Sub}} - 2m_{\text{Sub}}}{N_{\text{Sub}}}. \quad (4.139)$$

Die Renormierung des Betrages der Magnetisierung erfolgt in Bezug auf das Subsystems, d. h. es ist

$$\hat{\mu}_{\text{BR}, \text{Sub}}^x = \frac{\hat{\mu}_{\text{B}, \text{Sub}}^x - \mu_{\text{B}, \text{sub}, \text{min}}^x}{1 - \mu_{\text{B}, \text{sub}, \text{min}}^x}. \quad (4.140)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der $\mu_{\text{Sub}, m_{\text{Sub}}}^x$ zum Zeitpunkt t ist gegeben durch

$$p_t(\mu_{\text{Sub}, m_{\text{Sub}}}^x) = \sum_{m, n} \frac{N_{m_{\text{Sub}}|m, n}}{N_{m, n}} |\alpha_{m, n}(t)|^2. \quad (4.141)$$

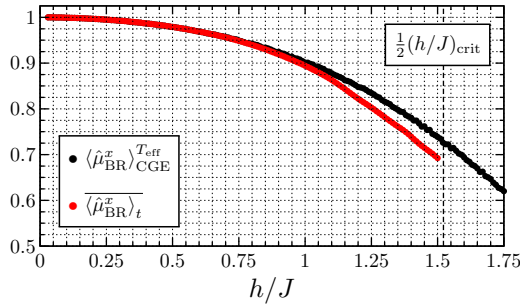
Die Bestimmung der Erwartungswerte der Observablen sowie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte der Operatoren für ein Subsystem des Systems im thermischen Gleichgewicht bei einer endlichen Temperatur erfolgt ebenfalls in weiten Teilen analog zu den Betrachtungen für den Erwartungswert der Observablen im Gesamtsystem. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Messungen der Observablen lediglich für das zu betrachtende Subsystem durchzuführen sind.

Im Folgenden wird der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung in einem 4×4 -System nach den Feldquenchs $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ untersucht und mit den thermischen Erwartungswerten für das

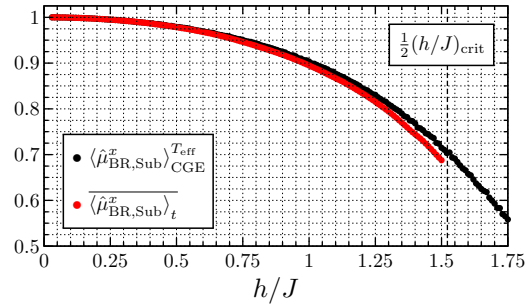
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Renormierter Betrag der Magnetisierung

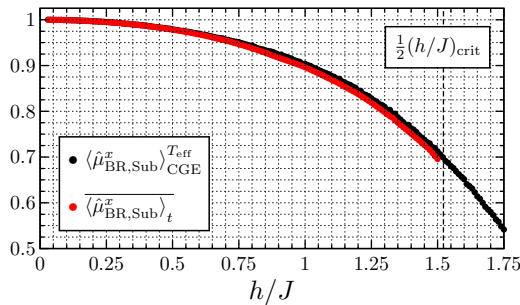
(a) 4×4 -System isoliert



(b) 4×4 -Subsystem des 8×8 -Systems



(c) 4×4 -Subsystem des 12×12 -Systems



(d) 4×4 -Subsystem des 16×16 -Systems

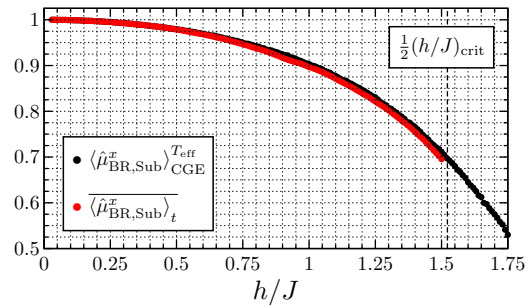


Abbildung 4.45: Vergleich des thermischen Erwartungswertes (\bullet) und des zeitlichen Mittelwertes ($\color{red}\bullet$) des renormierten Betrages der Magnetisierung (a) im isolierten 4×4 -System sowie in einem 4×4 -Subsystem des (b) 8×8 -, (c) 12×12 - und (d) 16×16 -Systems nach den Feldquenchs. Im Vergleich zum isolierten 4×4 -System zeigt sich für die Subsysteme eine deutlich verbesserte Übereinstimmung zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Erwartungswerten, die mit der Größe des Bades zunimmt.

System im Gleichgewicht bei der effektiven Temperatur des Systems nach dem Quench verglichen. Das 4×4 -System wird einerseits isoliert sowie andererseits als Subsystem eines 8×8 -, 12×12 - sowie 16×16 -Systems betrachtet. Die Resultate für den zeitlichen Verlauf des renormierten Betrages der Magnetisierung nach den betrachteten Feldquenchs sind in Abbildung 4.44 dargestellt. Wie den Graphen entnommen werden kann, nehmen die zeitlichen Fluktuationen des Erwartungswertes um seinen zeitlichen Mittelwert mit der Größe des Bades wie vorhergesagt ab. Der Vergleich der zeitlichen Mittelwerte des renormierten Betrages der Magnetisierung zu den Erwartungswerten für das System im thermischen Gleichgewicht in Abbildung 4.45 zeigt, dass sich durch die Einbettung des 4×4 -Systems in ein Bad eine bedeutend bessere Übereinstimmung von Zeit- und Ensemblemittel ergibt. Die Übereinstimmung wird dabei umso besser, je größer das Bad ist. Für das 16×16 -System bestehen nur noch geringe Abweichungen. Aus diesem Grunde gilt es nun, noch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte des Magnetisierungsoperators zu überprüfen. Diese sind in den Abbildungen 4.46 und 4.47 für die betrachteten Feldquenchs und die betrachteten Badgrößen dargestellt. Es zeigt sich, dass entgegen der guten Übereinstimmung der Zeit- und Ensemblemittel in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen weiterhin Abweichungen bestehen, die mit der Größe des Bades nicht abnehmen.

Um einen eventuellen Einfluss der kleinen Größe von 4×4 des Subsystems auf die Resultate abschätzen zu können, wird im Folgenden noch der renormierte Betrag der Magnetisierung für ein isoliertes 8×8 -System sowie ein 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems untersucht. In Abbildung 4.48 ist seine Zeitentwicklung nach den betrachteten Quenchprotokollen aufgetragen. Wie in den entsprechenden Graphen für das 4×4 -System in Abbildung 4.44 nimmt auch hier die Amplitude der Oszillationen um den zeitlichen Mittelwert für das Subsystem ab. In Abbildung 4.49 werden die Zeitmittelwerte des renormierten Betrages der Magnetisierung nach den Feldquenchs mit den thermischen Erwartungswerten für das System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur verglichen. Hierbei ist anders als für das 4×4 -System keine Verbesserung der Übereinstimmung durch die Einbettung des System in das

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Magnetisierung

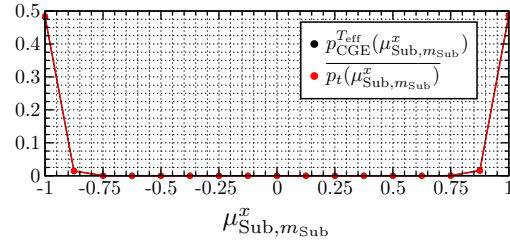
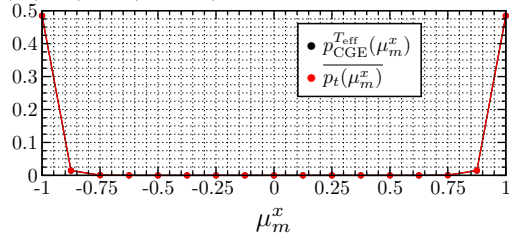
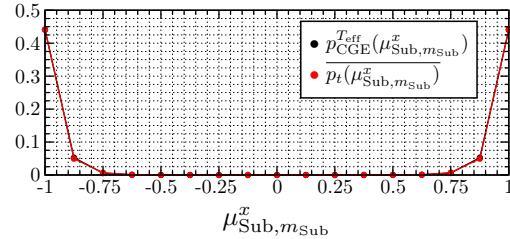
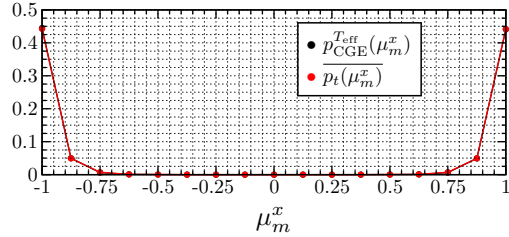
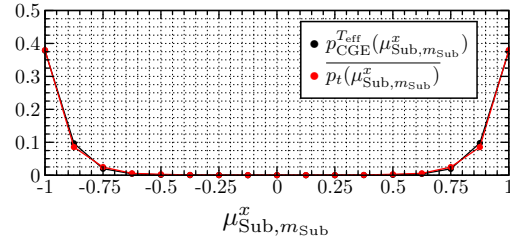
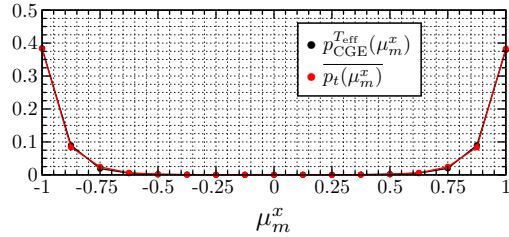
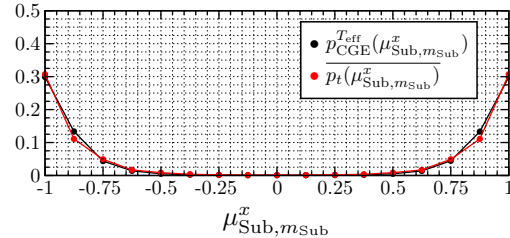
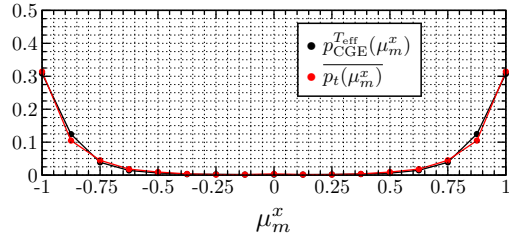
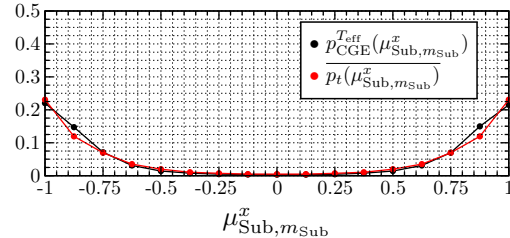
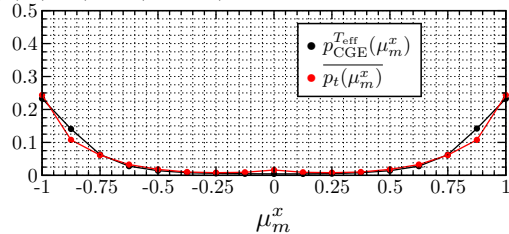
(a) 4×4 - System isoliert(b) 4×4 - Subsystem des 8×8 - Systems(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$ (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$ (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$ 

Abbildung 4.46: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der möglichen Werte der Magnetisierung für (a) das isolierte 4×4 - System und (b) ein 4×4 - Subsystem des 8×8 - Systems. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

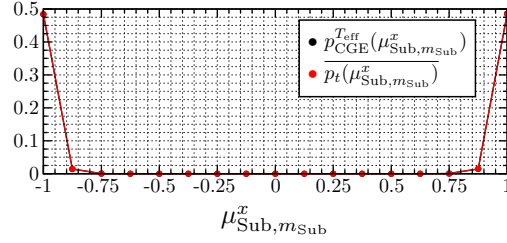
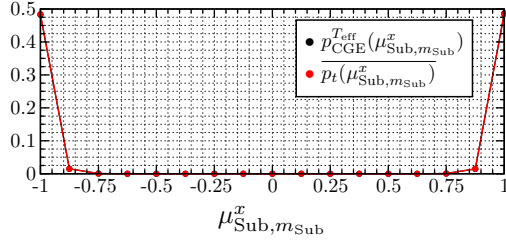
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Magnetisierung

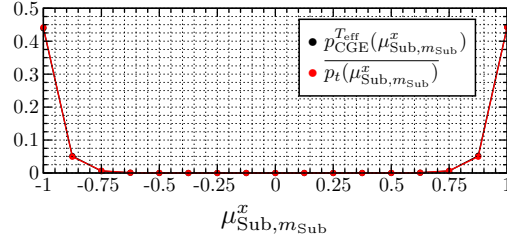
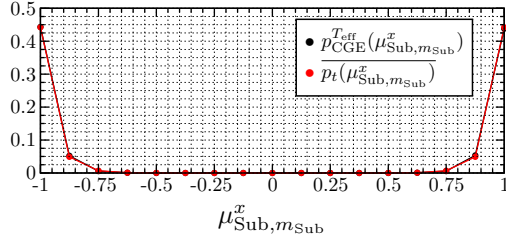
(a) 4×4 -Subsystem des 12×12 -Systems

(b) 4×4 -Subsystem des 16×16 -Systems

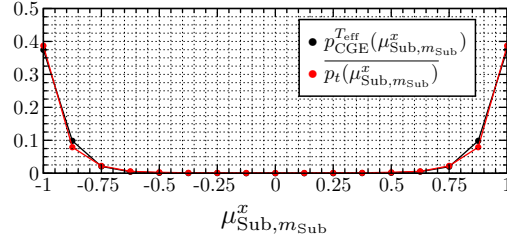
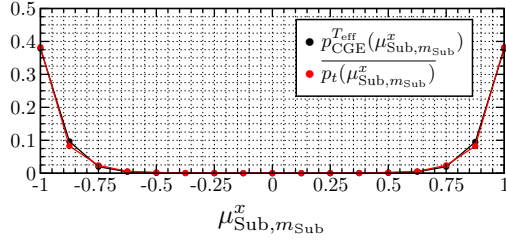
(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$



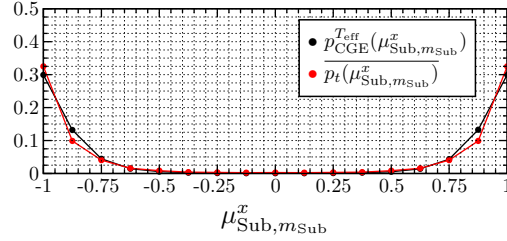
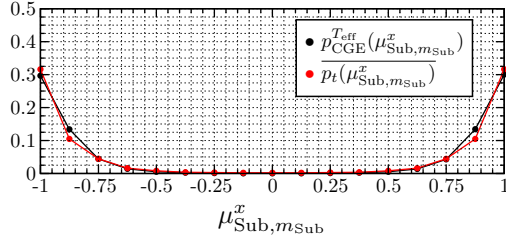
(ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$



(iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$



(iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$



(v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$

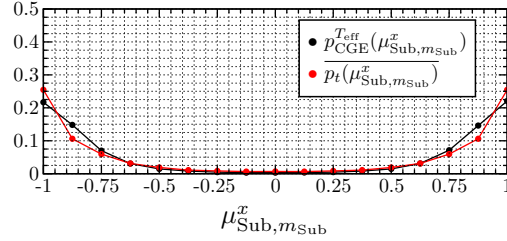
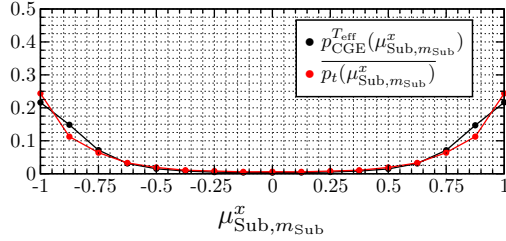
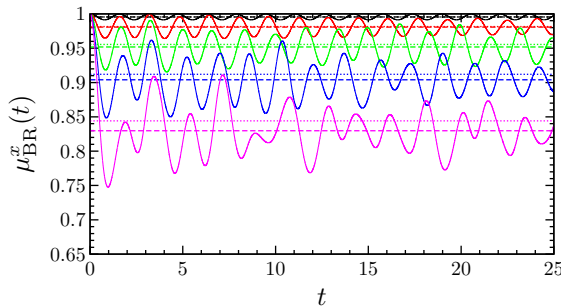


Abbildung 4.47: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der möglichen Werte der Magnetisierung für (a) ein 4×4 -Subsystem des 12×12 -Systems und (b) ein 4×4 -Subsystem des 16×16 -Systems. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Renormierter Betrag der Magnetisierung

(a) 8×8 -System isoliert



(b) 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems

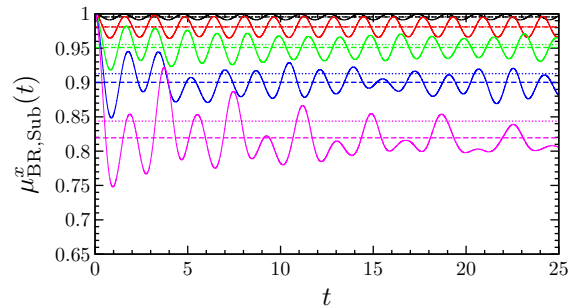


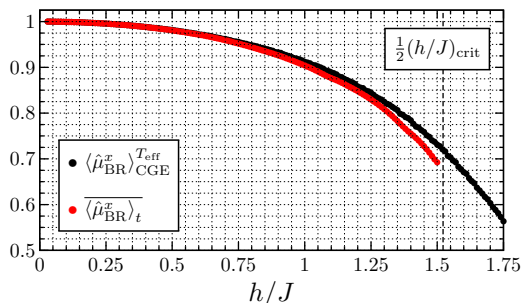
Abbildung 4.48: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes des renormierten Betrages der Magnetisierung (a) im isolierten 8×8 -System sowie (b) in einem 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems nach den Feldquenchs. Der Farbcode lautet – $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, – $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, – $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, – $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$, – $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$. Gestrichelte Linien geben die zeitlichen Mittelwerte über das Zeitintervall $[0, 25]$ an und gepunktete Linien die thermischen Erwartungswerte der Observablen im System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} .

Bad zu beobachten, sondern tendenziell verschlechtert sich die Übereinstimmung sogar. Zur genaueren Untersuchung dieser Beobachtung werden wiederum die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte μ_m^x des Magnetisierungsoperators den thermischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen gegenübergestellt. Die Auftragung erfolgt in Abbildung 4.50. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, zeigen sich abgesehen vom schwächsten Quenchprotokoll $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$ Unterschiede in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die mit der Quenchstärke zunehmen. Es besteht nach den Feldquenchs auch für das Subsystem eine gegenüber dem System im thermischen Gleichgewicht erhöhte Wahrscheinlichkeit, das System im vollständig geordneten Zustand vorzufinden, d. h. auch hier weist das System eine Erinnerung an seinen Anfangszustand auf. Insgesamt kann somit auch bei der Betrachtung von Subsystemen des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells festgehalten werden, dass das System nach Feldquenchs in der ferromagnetischen Phase nicht thermalisiert.

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Renormierter Betrag der Magnetisierung

(a) 8×8 -System isoliert



(b) 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems

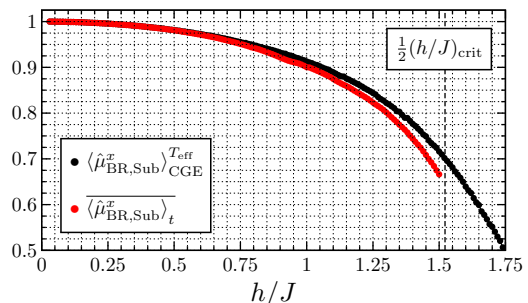


Abbildung 4.49: Vergleich des thermischen Erwartungswertes (●) und des zeitlichen Mittelwertes (●) des renormierten Betrages der Magnetisierung (a) im isolierten 4×4 -System sowie in einem 4×4 -Subsystem des (b) 8×8 -, (c) 12×12 - und (d) 16×16 -Systems nach den Feldquenchs. Im Vergleich zum isolierten 4×4 -System zeigt sich für die Subsysteme eine deutlich verbesserte Übereinstimmung zwischen den thermischen und den zeitgemittelten Erwartungswerten, die mit der Größe des Bades zunimmt.

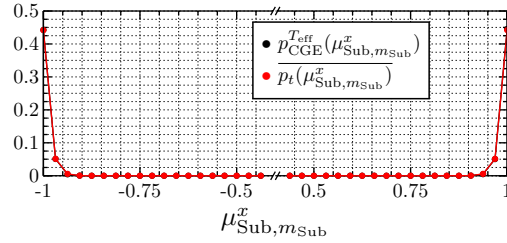
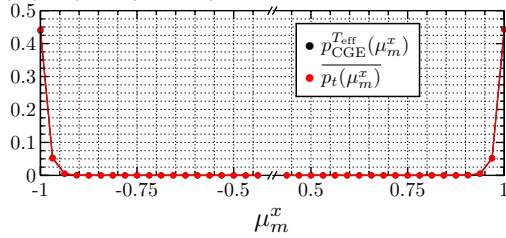
Feldquenchs ($J, 0$) \rightarrow (J, h)

Magnetisierung

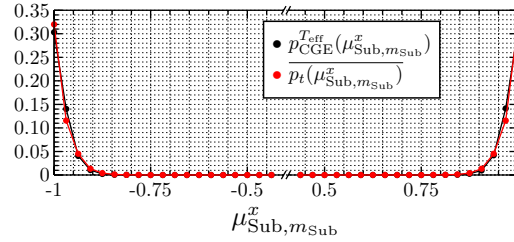
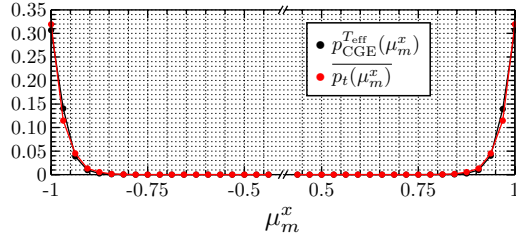
(a) 8×8 -System isoliert

(b) 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems

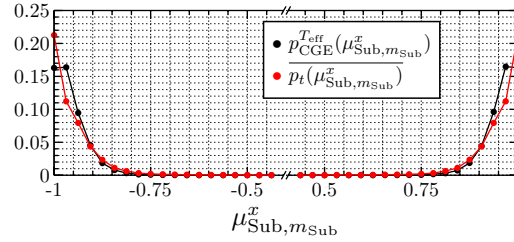
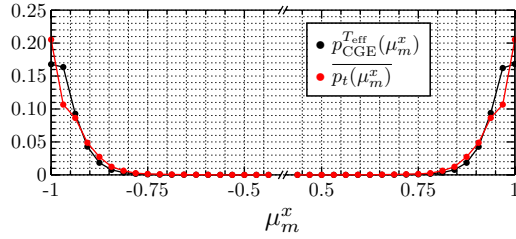
(i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$



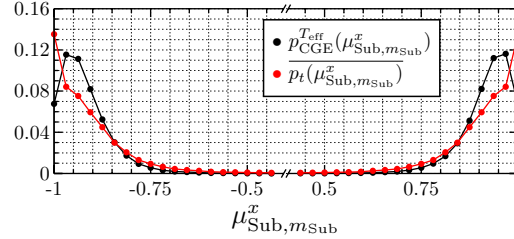
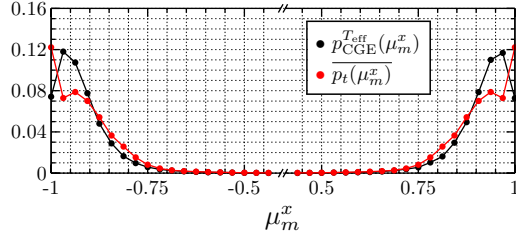
(ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$



(iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$



(iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$



(v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$

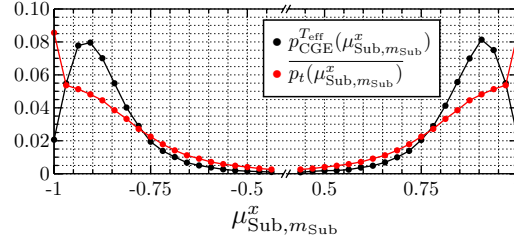
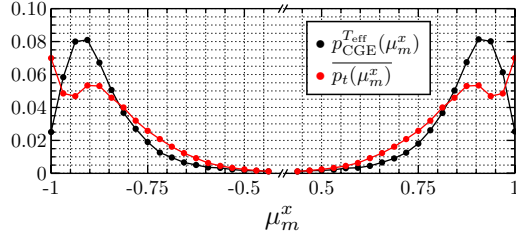
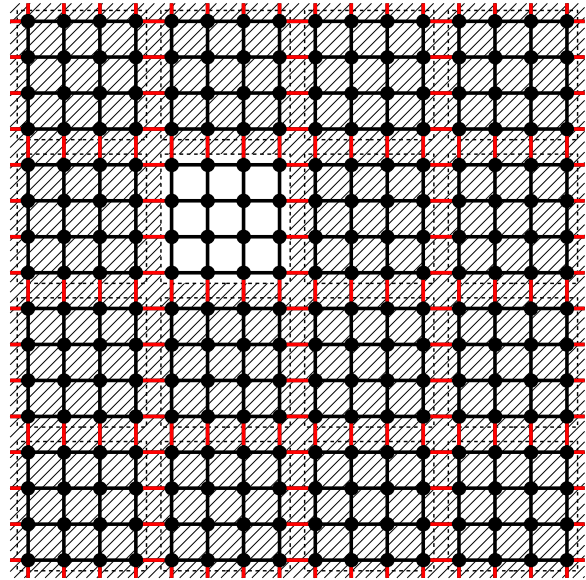


Abbildung 4.50: Wahrscheinlichkeitsverteilungen der möglichen Werte der Magnetisierung für (a) das isolierte 8×8 -System und (b) ein 8×8 -Subsystem des 16×16 -Systems. Verglichen werden die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für das System im thermischen Gleichgewicht (\bullet) bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} und die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen (\bullet) für das System nach den Feldquenchs (i) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, (ii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, (iii) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, (iv) $(1, 0) \rightarrow (1, 1)$ und (v) $(1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$.

Energie

Nach den Betrachtungen zum renormierten Betrag der Magnetisierung werde sich nun dem Erwartungswert der Energie innerhalb des Subsystems zugewandt. Zu diesem Zweck wird das System wie in Abbildung 4.51 veranschaulicht in identische Subsysteme aufgeteilt.

Abbildung 4.51: Unterteilung des Gesamtsystems in Subsysteme. Exemplarisch wird das 16×16 -System in Subsysteme der Größe 4×4 unterteilt. Die Position des Subsystems, für das die Observablen bestimmt werden (weiß hinterlegt), kann innerhalb des Gesamtsystems aufgrund der Homogenität des Systems, der periodischen Randbedingungen sowie der globalen Quenchs frei gewählt werden. Die weiteren Subsysteme bilden das Bad (schraffierte Fläche). In rot sind die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Subsystemen dargestellt. Jeder Wechselwirkungsterm umfasst die Kopplung einer Anzahl an Spinpaaren, die durch die Kantenlänge L_{Sub} der Subsysteme gegeben ist. Die Anzahl der Wechselwirkungsterme entspricht der doppelten Anzahl der Subsysteme. Das betrachtete Subsystem wechselwirkt über die Kopplungen entlang seiner Ränder mit dem Bad. Die Kopplungsterme, die das betrachtete Subsystem nicht betreffen, können in den Hamiltonoperator des Bades integriert werden.



Hieraus ergibt sich gegenüber den Betrachtungen zum renormierten Betrag der Magnetisierung eine Einschränkung der Kantenlängen des Subsystems auf Werte, für die die Kantenlänge des Gesamtsystems ein ganzzahliges Vielfaches ist. Betrachtet wird ein einzelnes dieser Subsysteme (weiß hinterlegt in Abbildung 4.51). Die restlichen Subsysteme bilden das Bad (schraffierter Bereich in Abbildung 4.51). Der Hamiltonoperator des Systems wird entsprechend aufgeteilt in Summanden, die die einzelnen Subsysteme beschreiben (schwarz dargestellt in Abbildung 4.51), sowie Summanden, die die Wechselwirkung der Subsysteme untereinander beschreiben (rote Kopplungen in Abbildung 4.51):

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_{\text{Sub},i} + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{\text{WW},i,j} . \quad (4.142)$$

Hierbei bezeichnet $\hat{H}_{\text{Sub},i}$ den Hamiltonoperator des i -ten Subsystems und $\hat{H}_{\text{WW},i,j}$ den Hamiltonoperator der Wechselwirkung zwischen Subsystem i und Subsystem j . Da aufgrund der Homogenität des Systems, der periodischen Randbedingungen sowie der betrachteten globalen Quenchs alle Subsysteme des Systems und somit auch die Kopplungen zwischen ihnen äquivalent sind, stimmen die Erwartungswerte sowohl der Energie in den Subsystemen als auch der Energie der Wechselwirkungen zwischen ihnen überein, sodass der zeitlich konstante Erwartungswert der Gesamtenergie des Systems geschrieben werden kann in der Form

$$\underbrace{\frac{1}{N} \langle \hat{H} \rangle_t}_E = \underbrace{\frac{1}{N_{\text{Sub}}} \langle \hat{H}_{\text{Sub}} \rangle_t}_{E_{\text{Sub}}(t)} + 2 \underbrace{\frac{1}{N_{\text{Sub}}} \langle \hat{H}_{\text{WW}} \rangle_t}_{E_{\text{WW}}(t)} . \quad (4.143)$$

\hat{H}_{Sub} ist der Hamiltonoperator eines Subsystems, \hat{H}_{WW} der Hamiltonoperator der Wechselwirkung zweier benachbarter Subsysteme. \hat{H}_{WW} umfasst lediglich die Korrelationsfunktionen zwischen den nächsten Nachbarn entlang der Ränder der beiden Subsysteme, von denen die eine Position in dem einen und die andere Position in dem anderen Subsystem liegt. Die Anzahl der Summanden in \hat{H}_{WW} ist somit durch die Kantenlänge des Subsystems gegeben. Der Erwartungswert der Wechselwirkungsenergie zwischen benachbarten Subsystemen kann auf einfache Weise bestimmt werden. Hierzu ist die Kenntnis der Anzahl der Kinks entlang des Randes des Subsystems in Abhängigkeit von der Anzahl m an Spin down sowie der

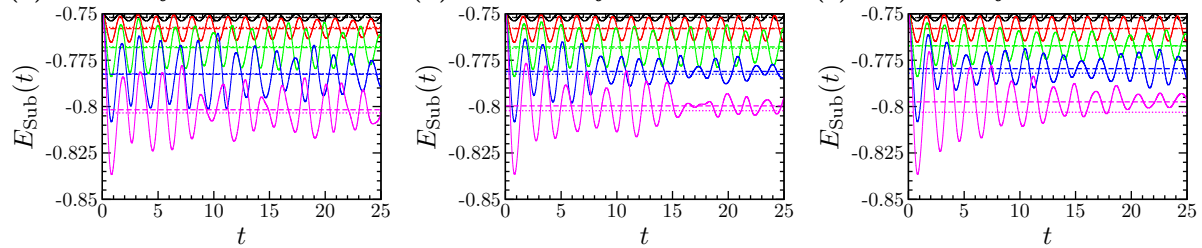
Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$
Erwartungswert der Energie in einem 4×4 -Subsystem des
(a) 8×8 -Systems
(b) 12×12 -Systems
(c) 16×16 -Systems


Abbildung 4.52: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes der Energie in einem 4×4 -Subsystem des (a) 8×8 -, (b) 12×12 - und (c) 16×16 - Systems nach den Feldquenchs. Der Farbcode lautet $- (1, 0) \rightarrow (1, 0.25)$, $- (1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$, $- (1, 0) \rightarrow (1, 0.75)$, $- (1, 0) \rightarrow (1, 1)$, $- (1, 0) \rightarrow (1, 1.25)$. Gestrichelte Linien geben die zeitlichen Mittelwerte über das Zeitintervall $[0, 25]$ an und gepunktete Linien die thermischen Erwartungswerte der Observablen im System im Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur T_{eff} .

Gesamtzahl n an Kinks im Gesamtsystem erforderlich. Diese wird mit $N_{n_{\text{Sub,rand}}|m,n}$ bezeichnet und wie $N_{m_{\text{Sub}}|m,n}$ ebenfalls im Rahmen des Monte-Carlo-Verfahrens zur Bestimmung der $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ ermittelt. Die Wahl der Lage des Subsystems innerhalb des Gesamtsystems ist dabei wiederum unerheblich. Mithilfe von $N_{n_{\text{Sub,rand}}|m,n}$ kann der Erwartungswert der Energie des Wechselwirkungsterms zwischen zwei Subsystemen geschrieben werden als

$$\langle \hat{H}_{\text{WW}} \rangle_t = \frac{1}{4} \left\{ -\frac{J}{2} \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \sum_{n_{\text{Sub,Rand}}} \frac{N_{n_{\text{Sub,rand}}|m,n}}{N_{m,n}} (4L_{\text{Sub}} - 2n_{\text{Sub,Rand}}) \right\}. \quad (4.144)$$

Der Vorfaktor $1/4$ rührt daher, dass die Anzahl der Kinks entlang des Randes des Subsystems für den gesamten Rand bestimmt wurde, der Wechselwirkungsterm jedoch nur eine Seite umfasst. Da der Erwartungswert der Energie des Gesamtsystems zeitlich konstant ist und für das betrachtete Quenchprotokoll den Wert $-J$ hat, kann der Erwartungswert der Energie des Subsystems unmittelbar angegeben werden. Er beträgt pro Spin des Subsystems

$$E_{\text{Sub}}(t) = -J + \frac{J}{2} \sum_{m,n} |\alpha_{m,n}(t)|^2 \sum_{n_{\text{Sub,Rand}}} \frac{N_{n_{\text{Sub,Rand}}|m,n}}{N_{m,n}} \cdot \frac{2L_{\text{Sub}} - n_{\text{Sub,Rand}}}{N_{\text{Sub}}}. \quad (4.145)$$

Da im Anfangszustand des Systems keine Kinks vorhanden sind, ergibt sich der Wert von $E_{\text{Sub}}(t=0)$ unmittelbar zu

$$E_{\text{Sub}}(t=0) = -J \cdot \frac{L_{\text{Sub}} - 1}{L_{\text{Sub}}}. \quad (4.146)$$

Dieser Wert stellt auch eine obere Schranke der Energie innerhalb des Subsystems pro Spin dar. In Abbildung 4.52 ist der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes der Energie in einem Subsystem der Größe 4×4 in einem Gesamtsystem der Größe (a) 8×8 , (b) 12×12 und (c) 16×16 für die verschiedenen Quenchprotokolle aufgetragen. Die gestrichelten Linien geben den zeitlichen Mittelwert des Erwartungswertes der Energie im Subsystem an, der über das Zeitintervall $[0, 25]$ gebildet wurde. Bei den gepunkteten Linien handelt es sich um den Erwartungswert der Energie im Subsystem, welches in ein System im thermischen Gleichgewicht bei der ihm nach dem Quench zugeschriebenen effektiven Temperatur eingebettet ist. Wie bereits für den renormierten Betrag der Magnetisierung zeigt sich auch für die Energie innerhalb eines Subsystems eine Abnahme der Amplitude der Oszillationen um den zeitlichen Mittelwert mit zunehmender Badgröße. Zum Vergleich der Zeitmittel und der Ensemblemittel sind in Abbildung 4.53 die zeitlichen Mittelwerte der Energie und die thermischen Erwartungswerte für das System im Gleichgewicht bei der effektiven Temperatur nach dem Feldquench dargestellt. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, nimmt der zeitliche Mittelwert der Energie des Subsystems mit zunehmender Quenchstärke ab. Dies kann dadurch

Feldquenchs $(J, 0) \rightarrow (J, h)$

Erwartungswert der Energie in einem 4×4 -Subsystem des

(a) 8×8 -Systems

(b) 12×12 -Systems

(c) 16×16 -Systems

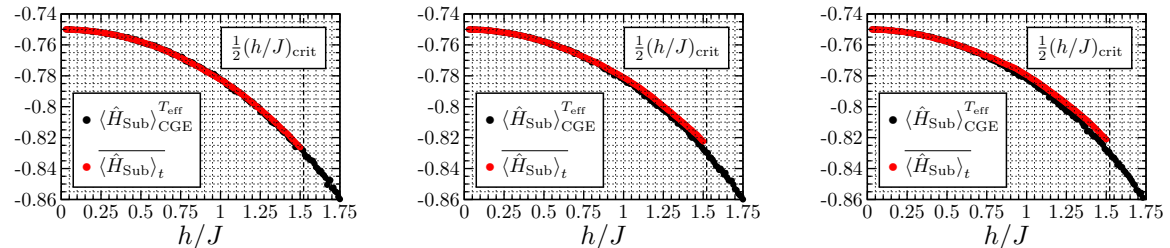


Abbildung 4.53: Vergleich des thermischen Erwartungswertes (●) und des zeitlichen Mittelwertes (●) der Energie in einem 4×4 -Subsystem des (a) 8×8 -, (b) 12×12 - und (c) 16×16 -Systems nach den Feldquenchs.

erklärt werden, dass durch stärkere Quenchs mehr Kinks im System erzeugt werden. Im Vergleich zu den Erwartungswerten der Energie eines Subsystems des sich im thermischen Gleichgewicht befindlichen Systems zeigen sich wiederum Abweichungen. Diese Abweichungen sind für eine gegebene Systemgröße umso ausgeprägter, je stärker der betrachtete Feldquenche ist. Da der Erwartungswert der Energie im Subsystem durch die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen den nächsten Nachbarn entlang der Ränder des Subsystems und des Bades bestimmt ist, ergibt sich zusätzlich durch die in Abbildung 4.31 (b) für die betrachteten Systemgrößen beobachtete Zunahme des zeitlichen Mittelwertes des Erwartungswertes der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn nach den stärkeren Feldquenchs eine Zunahme der Energie innerhalb des Subsystems mit Zunahme der Größe des Gesamtsystems. Mögliche Ursachen hierfür wurden bereits in der Diskussion zu Abbildung 4.31 erläutert. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte des Hamiltonoperators des Subsystems können nicht bestimmt werden, da die Betrachtungen in der x -Basis erfolgen, in der der Hamiltonoperator nicht diagonal ist.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich durch die Betrachtung von Subsystemen keine grundlegenden Änderungen an den getroffenen Aussagen in Bezug auf das Auftreten bzw. Nichtauftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell nach den Feldquenchs ergeben. Wie erwartet nehmen in den Subsystemen die Fluktuationen der Observablen um ihren zeitlichen Mittelwert mit zunehmender Größe des Bades ab. Während für das 4×4 -System eine Verbesserung der Übereinstimmung des zeitlichen Mittelwertes und des thermischen Erwartungswertes des Betrages der Magnetisierung beobachtet wurde, war dies für das 8×8 -System nicht der Fall. Die Verbesserungen für das 4×4 -System haben sich vor allem für starke Quenchs nahe zum Phasenübergang gezeigt. Als Ursache hierfür kann die kleine Größe des 4×4 -Systems angesehen werden, aufgrund derer das isolierte System insbesondere in der Nähe des Phasenüberganges bedingt durch die dort divergierende Korrelationslänge Abweichungen zu einem in ein Bad eingebettetes 4×4 -System zeigt. Für das 8×8 -System ist dieser Effekt schwächer ausgeprägt, sodass sich hier keine Verbesserung ergeben hat. Für beide Systemgrößen gilt es zu beachten, dass sich in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte des Magnetisierungsoperators weiterhin Unterschiede zeigen. Auch bestehen Unterschiede zwischen dem zeitlichen Mittelwert und dem thermischen Erwartungswert der Energie eines Subsystems. Infolgedessen kann auch bei Betrachtung von Subsystemen im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell nach den Feldquenchs nicht von Thermalisierung gesprochen werden.

4.10 Ausbreitung einer lokalen Störung

Nach den Untersuchungen des stationären Zustandes des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells auf das Auftreten von Thermalisierung nach den Wechselwirkungs- und den Feldquenches soll abschließend noch die Ausbreitung einer zu Beginn lokalen Störung im System betrachtet werden. Die Untersuchungen erfolgen in der ferromagnetischen Phase und erfordern ein Verfahren, das in der Lage ist, die Zeitentwicklung des Systems ausgehend von einem Anfangszustand mit einer lokalen Störung, d. h. ausgehend von einem inhomogenen Anfangszustand, zu beschreiben. Zudem muss das Verfahren für hinreichend große Systeme geeignet sein, um den erwarteten Übergang der Ausbreitung der anfänglich lokalen Störung gemäß der Manhattan-Metrik auf kurzen Abständen hin zur euklidischen Metrik für größere Abstände beobachten zu können. Das in den vorangegangenen Kapiteln beschriebene Variations-Monte-Carlo-Verfahren kann mit der Ansatzfunktion für die ferromagnetische Phase die Zeitentwicklung des Systems nach den Feldquenches zwar mit hoher Genauigkeit beschreiben, ist jedoch auf einen homogenen Anfangszustand angewiesen. Zudem sind die erreichbaren Systemgrößen nicht ausreichend. Aus diesem Grund wurde von Jonas Hafner im Rahmen seiner Masterarbeit [225] ein zeitabhängiges Mean-Field-Verfahren auf Grundlage der BBGKY-Hierarchie (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon) in Anlehnung an [248] an das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen angepasst. Die Ergebnisse der Untersuchungen wurden zusammen mit dem Autor der vorliegenden Dissertation in [62] veröffentlicht. Das Verfahren sowie die gewonnenen Resultate für das zweidimensionale transversale Ising-Modell sollen an dieser Stelle kurz zusammengefasst werden. Für die Details sei auf [225] verwiesen. Das verwendete Verfahren bestimmt die Zeitentwicklung des Bloch-Vektors

$$\mathbf{S}_{\mathbf{R}}(t) = \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{R}} \rangle_t \quad (4.147)$$

jedes Spins des Systems mithilfe von zeitabhängiger Mean-Field-Theorie unter Verwendung der BBGKY-Hierarchie. Die BBGKY-Hierarchie bezeichnet ein System von Differentialgleichungen, die die Dynamik eines Vielteilchensystems wechselwirkender Teilchen beschreiben. Das Verfahren weist eine hohe Flexibilität im Hinblick auf den verwendeten Anfangszustand auf und erlaubt die Betrachtung sehr großer Systemgrößen (im vorliegenden Fall ein Quadratgitter der Größe 101×101 , also ein System mit über 10^4 Spins). Die Genauigkeit des Verfahrens kann durch die Ordnung der BBGKY-Hierarchie gesteuert werden. Wird ein globaler Quench in Verbindung mit einem homogenen Anfangszustand betrachtet, so stimmen die Bloch-Vektoren aller Spins des Systems zu allen Zeiten überein und ihre Komponenten entsprechen der Magnetisierung des Systems in die entsprechende Raumrichtung. Die Bewegungsgleichungen des Bloch-Vektors des Spins an der Position \mathbf{R} des Gitters werden aus dem Ehrenfest-Theorem

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_t = \iota \langle [\hat{H}, \hat{\mathcal{O}}] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{O}}}{\partial t} \right\rangle_t \quad (4.148)$$

hergeleitet. Für sie ergibt sich

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^x = h S_{\mathbf{R}}^y, \quad (4.149a)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^y = J \sum_{k=1}^2 [C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}+\mathbf{e}_k}^{z x} + C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}-\mathbf{e}_k}^{z x}] - h S_{\mathbf{R}}^x, \quad (4.149b)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^z = -J \sum_{k=1}^2 [C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}+\mathbf{e}_k}^{y x} + C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}-\mathbf{e}_k}^{y x}]. \quad (4.149c)$$

Dabei ist $\mathbf{e}_1 = (1, 0)$ und $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$ sowie $C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\alpha \beta} := \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^{\alpha} \hat{\sigma}_{\mathbf{R}'}^{\beta} \rangle_t$. Dieses Differentialgleichungssystem ist nicht geschlossen, da die Zwei-Spin-Korrelationsfunktionen nicht bekannt sind und nicht auf einfache Weise bestimmt werden können. Um ein geschlossenes Differentialgleichungssystem zu erhalten, wird in erster Ordnung der BBGKY-Hierarchie die Mean-Field-Näherung

$$C_{\mathbf{R}, \mathbf{R} \pm \mathbf{e}_k}^{y/z x} = \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^{y/z} \hat{\sigma}_{\mathbf{R} \pm \mathbf{e}_k}^x \rangle_t \approx \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{R}}^{y/z} \rangle_t \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{R} \pm \mathbf{e}_k}^x \rangle_t = S_{\mathbf{R}}^{y/z} S_{\mathbf{R} \pm \mathbf{e}_k}^x \quad (4.150)$$

verwendet, die zu den Bewegungsgleichungen des Bloch-Vektors in erster Ordnung BBGKY-Hierarchie führt:

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^x = h S_{\mathbf{R}}^y, \quad (4.151a)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^y = J \sum_{k=1}^2 [S_{\mathbf{R}}^z S_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}}^z S_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k}^x] - h S_{\mathbf{R}}^x, \quad (4.151b)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^z = -J \sum_{k=1}^2 [S_{\mathbf{R}}^y S_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}}^y S_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k}^x]. \quad (4.151c)$$

Die Bewegungsgleichungen in zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie können hergeleitet werden, indem die Zwei-Spin-Korrelationsfunktionen in (4.149b) und (4.149c) wieder in das Ehrenfest-Theorem eingesetzt und die Erwartungswerte dreier Pauli-Spinoperatoren in den sich ergebenden neun Differentialgleichungen nacheinander aufgebrochen werden gemäß

$$\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C} \rangle_t \approx \langle \hat{A}\hat{B} \rangle_t \langle \hat{C} \rangle_t + \langle \hat{A}\hat{C} \rangle_t \langle \hat{B} \rangle_t + \langle \hat{B}\hat{C} \rangle_t \langle \hat{A} \rangle_t - 2 \langle \hat{A} \rangle_t \langle \hat{B} \rangle_t \langle \hat{C} \rangle_t. \quad (4.152)$$

Auf diese Weise ergeben sich die Bewegungsgleichungen in zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie:

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^x = h S_{\mathbf{R}}^y, \quad (4.153a)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^y = J \sum_{k=1}^2 [C_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz} + C_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz}] - h S_{\mathbf{R}}^x, \quad (4.153b)$$

$$\dot{S}_{\mathbf{R}}^z = -J \sum_{k=1}^2 [C_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xy} + C_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xy}], \quad (4.153c)$$

$$\dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xx} = h [C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xy} + C_{\mathbf{R}', \mathbf{R}}^{xy}], \quad (4.153d)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xz} = J \sum_{k=1}^2 & \left[(C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xz} - 2S_{\mathbf{R}}^x S_{\mathbf{R}'}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) + S_{\mathbf{R}}^x (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xz}) \right. \\ & \left. + S_{\mathbf{R}}^z (C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^{xx} + C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^{xx}) \right] - h [C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xx} + C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yy}], \end{aligned} \quad (4.153e)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{zy} = -J \sum_{k=1}^2 & \left[(C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{zy} - 2S_{\mathbf{R}}^x S_{\mathbf{R}'}^y) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) + S_{\mathbf{R}}^x (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{zy} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{zy}) \right. \\ & \left. + S_{\mathbf{R}}^y (C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^{xx} + C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^{xx}) \right] + h C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yz}, \end{aligned} \quad (4.153f)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yy} = J \sum_{k=1}^2 & \left[(C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yy} - 2S_{\mathbf{R}'}^y S_{\mathbf{R}}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) + S_{\mathbf{R}'}^y (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{yz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{yz}) \right. \\ & + S_{\mathbf{R}}^z (C_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy} + C_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy}) + (C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yz} - 2S_{\mathbf{R}}^y S_{\mathbf{R}'}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) \\ & \left. + S_{\mathbf{R}}^y (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xz}) + S_{\mathbf{R}'}^z (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz}) \right] - h [C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{xy} + C_{\mathbf{R}', \mathbf{R}}^{xy}], \end{aligned} \quad (4.153g)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yz} = J \sum_{k=1}^2 & \left[(C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yz} - 2S_{\mathbf{R}'}^z S_{\mathbf{R}}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) + S_{\mathbf{R}'}^z (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{yz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{yz}) \right. \\ & + S_{\mathbf{R}'}^z (C_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz} + C_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz}) - (C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yy} - 2S_{\mathbf{R}}^y S_{\mathbf{R}'}^y) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) \\ & \left. - S_{\mathbf{R}}^y (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy}) - S_{\mathbf{R}'}^z (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xy} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xy}) \right] - h C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{yz}, \end{aligned} \quad (4.153h)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{zz} = -J \sum_{k=1}^2 & \left[(C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{zz} - 2S_{\mathbf{R}}^y S_{\mathbf{R}'}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) + S_{\mathbf{R}}^y (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{zz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{zz}) \right. \\ & + S_{\mathbf{R}'}^z (C_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz} + C_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz}) + (C_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{zz} - 2S_{\mathbf{R}'}^y S_{\mathbf{R}}^z) (S_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k}^x + S_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k}^x) \\ & \left. + S_{\mathbf{R}}^z (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}'}^{xy}) + S_{\mathbf{R}'}^y (C_{\mathbf{R}'+\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz} + C_{\mathbf{R}'-\mathbf{e}_k, \mathbf{R}}^{xz}) \right]. \end{aligned} \quad (4.153i)$$

Die Erweiterung auf höhere Ordnungen folgt unmittelbar. Diese sind erforderlich, um den stationären Zustand des Systems und das Auftreten von Thermalisierung im System untersuchen zu können. Dagegen kann, wie sich im Folgenden zeigen wird, die Ausbreitung einer lokalen Störung bereits in erster Ordnung BBGKY-Hierarchie mit hoher Genauigkeit beschrieben werden.

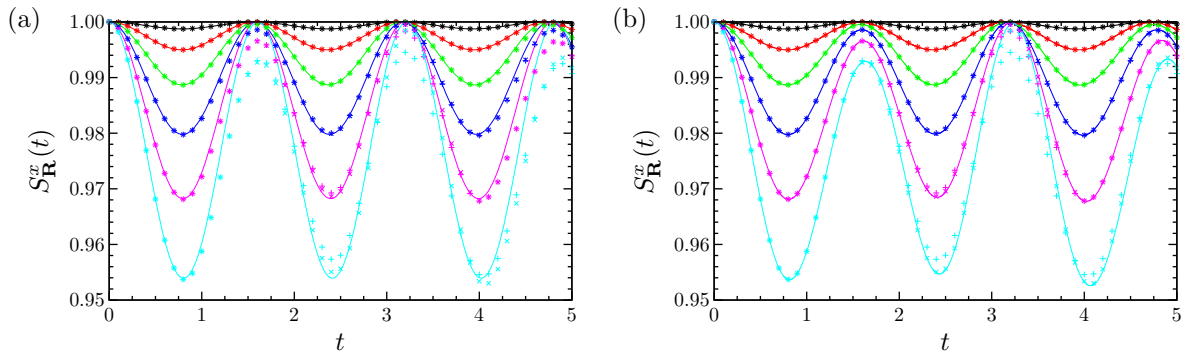


Abbildung 4.54: Vergleich der Resultate der zeitabhängigen Mean-Field-Theorie in (a) erster und (b) zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie für die x -Komponente des Bloch-Vektors $S_{\mathbf{R}}^x(t)$ eines einzelnen Spins (durchgezogene Linie) nach Feldquenchs ausgehend vom vollständig geordneten Zustand zu den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens (+) und der zeitabhängigen Störungsrechnung 8. Ordnung (\times). Der Farbcode lautet – $h/J = 0.1$, – $h/J = 0.2$, – $h/J = 0.3$, – $h/J = 0.4$, – $h/J = 0.5$, – $h/J = 0.6$. Bereits in erster Ordnung BBGKY-Hierarchie zeigt sich für die betrachteten Quenchprotokolle und Zeitintervalle eine gute Übereinstimmung, die sich in zweiter Ordnung weiter verbessert.

Zur Bestimmung des Parameterbereiches, für den die zeitabhängige Mean-Field-Theorie in erster und zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie die Zeitentwicklung des Systems in der ferromagnetischen Phase gut approximiert, werden in Abbildung 4.54 ihre Resultate für die Magnetisierung des Systems in x -Richtung, d. h. die x -Komponente des Bloch-Vektors, nach Feldquenchs ausgehend vom vollständig geordneten Anfangszustand

$$|\psi_{\text{or}}\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x \quad (4.154)$$

mit denjenigen der zeitabhängigen Störungstheorie 8. Ordnung sowie des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens verglichen, wobei im Falle des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens der renormierte Betrag der Magnetisierung für das 16×16 -System ausgehend vom Anfangszustand (4.111) betrachtet wird. Für Werte des Transversalfeldes bis hin zu $h/J = 0.6$, für die das System wie Abbildung 4.13 (b) zu entnehmen ist die ferromagnetische Phase nicht verlässt, zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Resultaten der drei unterschiedlichen Methoden. Diese Übereinstimmung besteht bereits in erster Ordnung der BBGKY-Hierarchie und wird in zweiter Ordnung noch besser. Weiterhin besteht sie auch für Zeiten größer als das in Abbildung 4.54 aus Gründen der Übersichtlichkeit dargestellte Zeitintervall von $[0, 5]$. Werden hingegen größere Feldstärken betrachtet, so nimmt die Genauigkeit der Resultate der zeitabhängigen Mean-Field-Theorie ab, sodass sich im Folgenden auf Verhältnisse $h/J \leq 0.6$ beschränkt werden wird. Nach der Bestimmung des Bereiches von h/J , für den die zeitabhängige Mean-Field-Theorie die Zeitentwicklung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells gut approximiert, werde nun die Ausbreitung einer anfänglich lokalen Störung durch das System untersucht. Die zeitabhängige Mean-Field-Theorie ist aufgrund ihrer Flexibilität im Hinblick auf den Anfangszustand des Systems sowie die großen erreichbaren Systemgrößen hierzu besonders geeignet. Die lokale Störung des Anfangszustandes wird dadurch realisiert, dass gegenüber dem geordneten Zustand in (4.154) ein einzelner Spin die Orientierung down hat:

$$|\psi_{\text{lp}}\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_x \quad (4.155)$$

Aufgrund der periodischen Randbedingungen kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit $(0, 0)$ als Position des Spin down im Anfangszustand gewählt werden. Um zu entscheiden, wann die Störung die Strecke $\mathbf{r} = (r_x, r_y)$ zurückgelegt hat, wird die Differenz

$$\Delta_{\mathbf{r}}(t) = \langle \psi_{\text{lp}} | \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}(t) | \psi_{\text{lp}} \rangle - \langle \psi_{\text{or}} | \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}(t) | \psi_{\text{or}} \rangle \quad (4.156)$$

zwischen der Zeitentwicklung ausgehend von dem Zustand (4.155) mit der lokalen Störung und der Zeitentwicklung ausgehend vom vollständig geordneten Zustand (4.154) betrachtet. Da die Störung mit endlicher Geschwindigkeit durch das System propagiert, verschwindet $\Delta_{\mathbf{r}}(t)$ für Zeiten, zu denen die

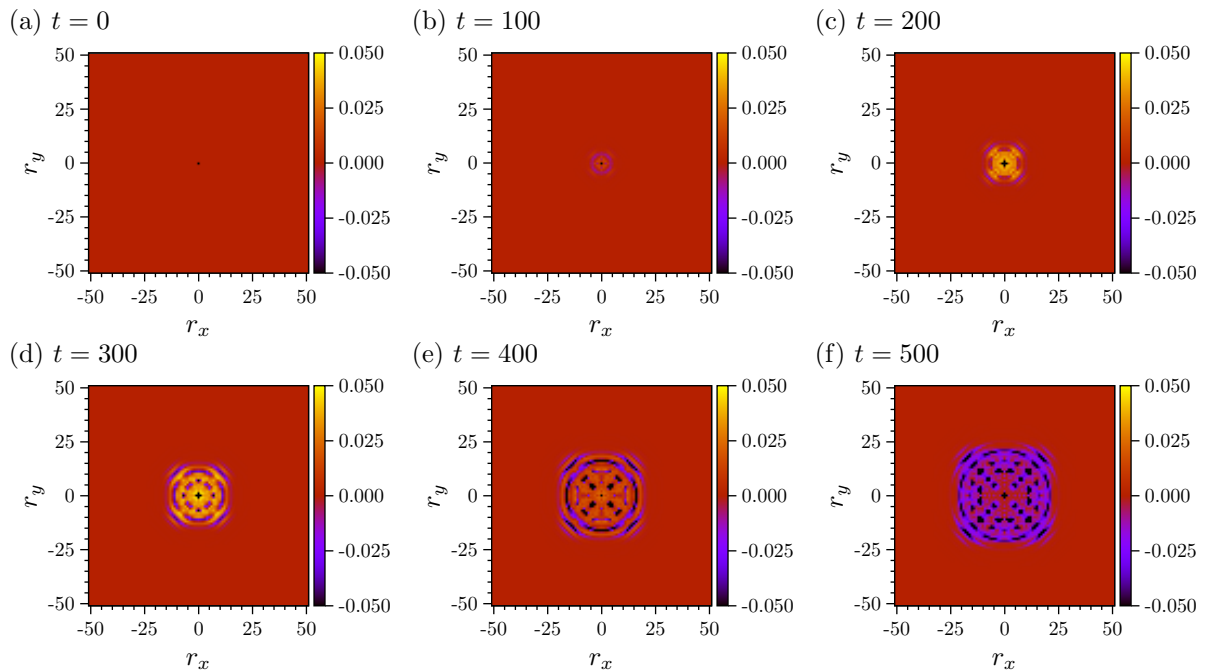


Abbildung 4.55: $\Delta_{\mathbf{r}}^x(t)$ zu verschiedenen Zeitpunkten t für das 101×101 -System mit $J = 1$ und $h = 0.6$. Im Anfangszustand zum Zeitpunkt $t = 0$ hat der Spin an der Position $(0, 0)$ die Orientierung down, die Spins an allen anderen Positionen des Systems die Orientierung up. Für größere Zeiten propagiert die Störung mit einer endlichen Geschwindigkeit durch das System. Für große Abstände tritt die Gitterstruktur in den Hintergrund und die Ausbreitung erfolgt gemäß der euklidischen Metrik, sodass sich ein kreisförmiger Light Cone ergibt.

Störung die Strecke \mathbf{r} noch nicht zurückgelegt hat.

Die Zeit $t_{\text{arrival}}(\mathbf{r})$, zu der die Störung die Strecke \mathbf{r} zurückgelegt hat, sei definiert als der Zeitpunkt, zu dem $\Delta_{\mathbf{r}}^x(t)$ erstmals ungleich null ist. Abbildung 4.55 zeigt Momentaufnahmen der x -Komponente $\Delta_{\mathbf{r}}^x(t)$ zu verschiedenen Zeitpunkten t für das 101×101 -System mit $h/J = 0.6$. Wie dem Vergleich der Momentaufnahmen für verschiedene Werte von t entnommen werden kann, propagiert die anfängliche lokale Störung mit einer endlichen Geschwindigkeit durch das System und führt dadurch zur Entstehung eines Light Cones. Der Bereich des Systems, der bereits von der Ausbreitungsfront passiert wurde, weist komplizierte Amplitudenmuster auf hervorgerufen durch Interferenzeffekte. Zur Untersuchung der Geometrie des Light Cones und damit der Bestimmung der Metrik, der die Ausbreitung der Störung durch das System folgt, ist in Abbildung 4.56 die Ankunftszeit $t_{\text{arrival}}(\mathbf{r})$ der Störung für die verschiedenen Positionen des Systems als Konturdiagramm aufgetragen. Während für kleine Abstände eine um $\pi/4$ gegenüber den Gitterachsen gedrehte quadratische Form der Front anzeigt, dass die Ausbreitung der Störung gemäß der Manhattan-Metrik erfolgt, wie beispielsweise von Carleo *et al.* auch für das zweidimensionale Bose-Hubbard-Modell in [99] gezeigt wurde, so nähert sich die Form der Wellenfront für größere Abstände der Kreisform an wie im Falle der Gültigkeit der euklidischen Metrik. Dies zeigt, dass für große Abstände die Gitterstruktur zunehmend in den Hintergrund tritt und sich das System wie ein Kontinuum verhält. Mithilfe der Resultate für t_{arrival} kann die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Störung über

$$v(h) = \frac{d(\mathbf{r})}{t_{\text{arrival}}(h, \mathbf{r})} \quad (4.157)$$

bestimmt werden. Indem die Ausbreitung entlang der Achse betrachtet wird, kann die Frage umgangen werden, ob der Abstand $d(\mathbf{r})$ zweier Positionen auf dem Gitter in der Manhattan-Metrik oder der euklidischen Metrik gemessen werden muss, denn für $\mathbf{r} = (r, 0)$ ist $d_{\text{Eukl}}(\mathbf{r}) = d_{\text{Manh}}(\mathbf{r}) = r$. Mithilfe der entsprechenden Ergebnisse für t_{arrival} wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit v der Störung als Funktion von h/J bestimmt. Abbildung 4.57 (a) zeigt die Ergebnisse für t_{arrival} entlang der Achse als Funktion des Abstandes r für $J = 1$ und Werte des Transversalfeldes bis hin zu $h = 0.6$ bestimmt mithilfe zeitabhängiger

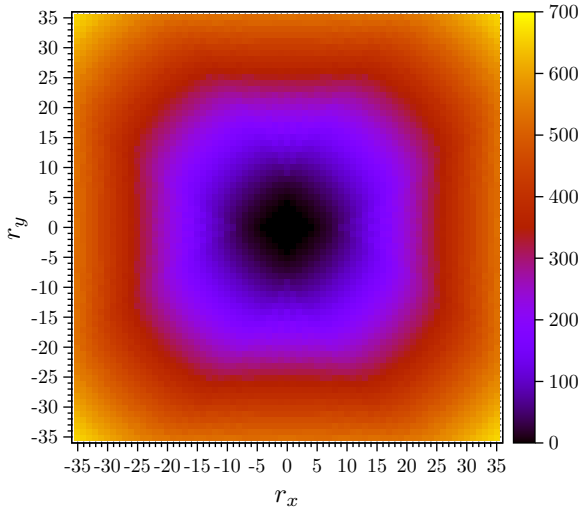


Abbildung 4.56: Aus den Resultaten der zeitabhängigen Mean-Field-Theorie erster Ordnung für $J = 1$ und $h = 0.6$ bestimmte Ankunftszeit der an der Position $(0, 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ gestarteten Störung im 101×101 -System. Auf kurzen Abständen folgt die Ausbreitung der Störung der Manhattan-Metrik, wohingegen für größere Abstände die Gitterstruktur in den Hintergrund tritt und die Ausbreitung der Störung nahezu der euklidischen Metrik wie in einem Kontinuummodell entspricht mit einer kreisförmigen Ausbreitungsfrent.

Mean-Field-Theorie in erster Ordnung BBGKY-Hierarchie. Sobald ein von h/J abhängiger Mindestabstand überwunden wurde, zeigt sich ein lineares Wachstum von t_{arrival} mit r , d. h. die Störung breitet sich für hinreichend große Abstände mit konstanter Geschwindigkeit entlang der Achse aus. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist durch die inverse Steigung der Fitgeraden gegeben. In Abbildung 4.57 (b) ist v als Funktion von h bestimmt mithilfe der zeitabhängigen Mean-Field-Theorie in erster und zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie dargestellt. Für die betrachteten Werte h des Transversalfeldes zeigt sich ein quadratischer Anstieg von v mit h

$$v \propto h^2 \tag{4.158}$$

mit nur geringen Abweichungen zwischen den Vorhersagen der unterschiedlichen Ordnungen. Dies steht in klarem Gegensatz zu Resultaten für das eindimensionale transversale Ising-Modell, für das in der ferromagnetischen Phase ein linearer Anstieg der Geschwindigkeit mit h besteht und die Geschwindigkeit in der paramagnetischen Phase den konstanten Wert J hat. Eine Erklärung für den Verlauf der Geschwindigkeit mit h wurde für das eindimensionale transversale Ising-Modell im Rahmen der semiklassischen Theorie gegeben. Laut dieser ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Störung durch die Maximalgeschwindigkeit der Quasiteilchen bestimmt, die in (3.136) angegeben ist. Eine Herleitung des linearen Anstiegs der Geschwindigkeit mit h im eindimensionalen transversalen Ising-Modell in der ferromagnetischen Phase sowie des quadratischen Anstiegs der Geschwindigkeit mit h im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell

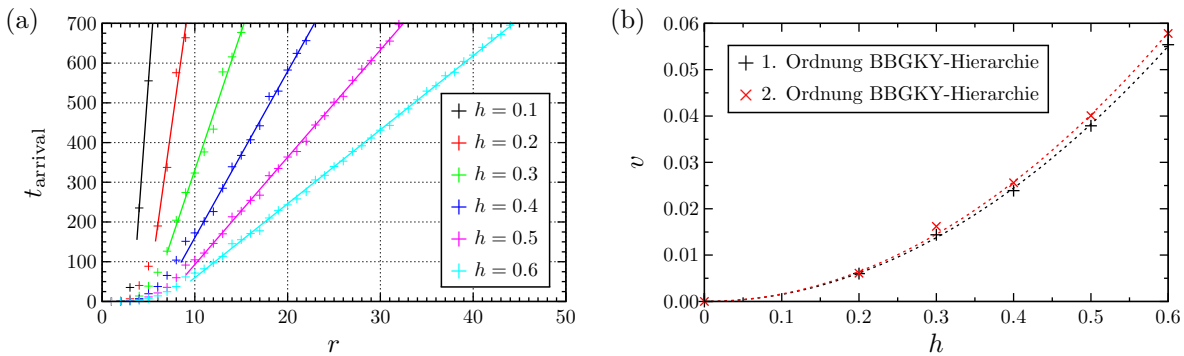


Abbildung 4.57: (a) Ankunftszeit der Störung entlang der Achse für $J = 1$ und verschiedene Werte h des Transversalfeldes bestimmt mithilfe von zeitabhängiger Mean-Field-Theorie in erster Ordnung BBGKY-Hierarchie. (b) Ausbreitungsgeschwindigkeit der Störung entlang der Achse in erster und zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie. Für den betrachteten Bereich der Werte des Transversalfeldes wächst die Geschwindigkeit quadratisch mit h . Dies ist durch die Least-Square-Fits der Datenpunkte proportional zu h^2 angedeutet.

in der ferromagnetischen Phase kann mithilfe der Spinwellentheorie erfolgen. Filatova und Tsukernik haben 1975 in [249] gezeigt, dass die Spinwellenenergie des eindimensionalen transversalen Ising-Modells für kleine Transversalfelder linear mit h skaliert, während in höheren Dimensionen ein quadratischer Zusammenhang besteht. Da die Geschwindigkeit der Störung durch den Gradienten der Spinwellenenergie in Bezug auf die Wellenzahl gegeben ist, bleibt diese Beziehung auch für die Geschwindigkeit der Störung erhalten. Insbesondere folgt aus der Spinwellentheorie, dass der für das zweidimensionale transversale Ising-Modell gefundene quadratische Anstieg der Geschwindigkeit mit dem Transversalfeld für alle Dimensionen $d > 1$ zu erwarten ist. Eine Erklärung für die Unterschiede zwischen dem eindimensionalen transversalen Ising-Modell und dem transversalen Ising-Modell in höheren Dimensionen im Rahmen der Störungstheorie wurde ebenfalls in [249] gegeben. Abgesehen von dem unterschiedlichen Verlauf mit h ist die Geschwindigkeit der Ausbreitung der Störung für die betrachteten Werte von h im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell bedeutend niedriger als im Modell in einer Dimension. Diese Beobachtung kann folgendermaßen erklärt werden. Für die betrachteten Verhältnisse von Transversalfeld h zu Kopplungskonstante J befindet sich das System tief in der ferromagnetischen Phase, d. h. der energetische Beitrag, der sich aus den Kopplungen zwischen den Spins ergibt, ist dominant gegenüber dem Beitrag aus der Wechselwirkung mit dem externen transversalen Feld. Die Ausbreitung der Störung ist mit dem Umklapp von Spins verbunden. Werden in einer Dimension sukzessive Spins umgeklappt, so bleibt die Anzahl an Kinks im System konstant. Im zweidimensionalen System hingegen bewirkt die Ausbreitung der Störung immer die Erzeugung neuer Kinks, da die Grenzfläche der Ausbreitungsfront der Störung während ihrer Ausbreitung immer weiter zunimmt. Aus diesem Grund ist die Ausbreitung der Störung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell tief in der ferromagnetischen Phase energetisch ungünstiger als im eindimensionalen Modell. Für größere Verhältnisse h/J , für die der energetische Beitrag bedingt durch Kinks an Bedeutung verliert gegenüber dem Beitrag aus der Wechselwirkung mit dem Transversalfeld, ist daher anzunehmen, dass sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Störung im ein- und im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell annähert.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ising-Modell, das ursprünglich im Jahre 1925 von Ernst Ising als Modell klassischer Spins mit kontinuierlicher Orientierung zur Beschreibung des Magnetismus in Festkörpern formuliert wurde, hat in der theoretischen Physik eine große Bedeutung erlangt. Seine quantenmechanische Formulierung, die auf einem Gitter angeordnete Spin-1/2 beschreibt, stellt heute eines der Standardmodelle der Quantenmechanik zur Beschreibung von gitterbasierten Spinsystemen dar und es existieren zahlreiche Erweiterungen und Verallgemeinerung beispielsweise in Form des XY-Modells oder durch Hinzunahme von Longitudinal- bzw. Transversalfeldern oder langreichweitiger Wechselwirkungen. Da das Ising-Modell und viele der von ihm abgeleiteten Modelle in einer Dimension aufgrund der Diagonalisierbarkeit des Hamiltonoperators durch Transformation auf ein System freier Fermionen exakt lösbar sind, kommt ihnen eine große Bedeutung bei der Erprobung neuer Konzepte und Techniken zu. Abseits theoretischer Überlegungen zeichnet sich auch eine Bedeutung des Ising-Modells für die in der Einleitung der Dissertation beschriebenen Quantencomputer ab. Wegen ihrer zwei möglichen Zustände können die einzelnen Spin-1/2 mit Qubits identifiziert werden, sodass das Ising-Modell zur Beschreibung von Quantenregistern verwendet werden kann. Hierbei ist insbesondere die Nichtgleichgewichtsdynamik des Systems von Bedeutung, die auch bei einem perfekt gegenüber seiner Umgebung isolierten System auftritt, wenn sein Anfangszustand kein Eigenzustand des die Zeitentwicklung bestimmenden Hamiltonoperators ist. Für Quantencomputer sind dabei vor allem die Zeitskala der Relaxation und der stationäre Zustand des Systems relevant sowie die Änderung der Verschränkung der Qubits unter der Zeitentwicklung. Mit eben diesem Thema der Nichtgleichgewichtsdynamik im transversalen Ising-Modell hat sich auch die vorliegende Dissertation auf den vorangegangenen Seiten beschäftigt. Konkret wurde für das transversale XY-Modell in einer Dimension sowie für das transversale Ising-Modell in zwei Dimensionen die Zeitentwicklung unterschiedlicher Observablen nach verschiedenen Quenchprotokollen untersucht. Das Augenmerk der Untersuchungen lag dabei zum einen darauf, mit welcher Geschwindigkeit und gemäß welcher Metrik sich eine Störung durch das System ausbreitet. Zum anderen wurde untersucht, ob das System nach den Quenches equilibriert und wie sein stationärer Zustand aussieht. Ziel der Untersuchungen des stationären Zustandes war dabei die Herstellung eines Zusammenhanges zwischen der Nichtgleichgewichtsdynamik des Systems und der statistischen Physik. Zu diesem Zweck wurde die Frage beantwortet, ob das System in seinem stationären Zustand nach den Quenches durch ein bekanntes Ensemble der statistischen Physik beschrieben werden kann. Besonderes Interesse galt hierbei der Klärung der Frage, ob das System thermalisiert, d. h. ob sein stationärer Zustand durch das kanonische Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann und somit die aus der klassischen Physik bekannte Ergodenhypothese auch für das quantenmechanische transversale Ising-Modell gilt. Die Untersuchungen des eindimensionalen transversalen XY-Modells auf der einen Seite und des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells auf der anderen Seite erfolgten aufgrund der Unterschiede zwischen den Modellen bedingt durch ihre Dimensionalität, die in ihnen vorhandenen Erhaltungsgrößen sowie die unterschiedlichen erforderlichen Methoden zu ihrer Beschreibung getrennt voneinander.

Eindimensionales transversales XY-Modell

Das Ziel der Untersuchungen der Nichtgleichgewichtsdynamik im eindimensionalen Fall bestand darin, die von Rieger und Iglói für das eindimensionale transversale Ising-Modell in [43, 45] entwickelte semiklassische Beschreibung des Relaxationsprozesses auf das transversale XY-Modell zu erweitern. Das Vorgehen basierte darauf, dass der Hamiltonoperator des eindimensionalen transversalen XY-Modells wie der Hamiltonoperator des eindimensionalen transversalen Ising-Modells durch eine Transformation auf ein System freier Fermionen diagonalisiert werden kann und beide Hamiltonoperatoren in Diagonalgestalt die gleiche Struktur aufweisen. Sowohl das eindimensionale transversale Ising-Modell als auch das eindimensionale transversale XY-Modell können somit in Form einer freien Theorie formuliert werden. Dies ist von entscheidender Bedeutung, da anzunehmen ist, dass die semiklassische Beschreibung auf alle freien Theorien angewendet werden kann. Bei den Quasiteilchen der semiklassischen Theorie handelt es sich im Falle des transversalen Ising- und XY-Modells in der ferromagnetischen Phase um gebrochene Kopplungen zwischen benachbarten Spins, sogenannte Kinks. Für die betrachteten globalen Quenches werden die Quasiteilchen an jeder Position der Kette zu jeder Wellenzahl paarweise erzeugt, wobei die Quasiteilchen eines Paares verschränkt sind und aufgrund der Impulserhaltung zum Zeitpunkt ihrer Erzeugung entgegengesetzte Geschwindigkeiten haben. Im transversalen Ising-Modell erfolgt die

Propagation der Quasiteilchen durch Wirkung des Transversalfeldes, welches einzelne Spins des Systems umklappt. Für die im XY-Modell gegenüber dem Ising-Modell hinzugekommene Kopplung der Spins in y -Richtung wurde gezeigt, dass sie einen vergleichbaren Effekt aufweist wie das Transversalfeld, durch sie jedoch immer zwei benachbarte Spins umgeklappt werden. Die durch die Wirkung der genannten Anteile des Hamiltonoperators auf den Zustand des Systems propagierten Quasiteilchen bewegen sich ballistisch mit konstanter Geschwindigkeit und ohne Wechselwirkung untereinander durch das System. Die Bestimmung ihrer Geschwindigkeit erfolgt dabei im transversalen XY-Modell wie im transversalen Ising-Modell über die partielle Ableitung der Energien der Moden des Hamiltonoperators nach der Wellenzahl. Aufgrund der oben beschriebenen Wirkung der Kopplung der Spins in y -Richtung ergibt sich hierbei eine Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Anisotropie. Die Besetzungszahl der Quasiteilchen wird ebenfalls von der Anisotropie beeinflusst. Mithilfe der semiklassischen Theorie wurden die lokale Magnetisierung, die gleichzeitige Korrelationsfunktion zwischen zwei Spins sowie die Verschränkungsentropie zwischen zwei Subsystemen des eindimensionalen transversalen XY-Modells mit freien und mit periodischen Randbedingungen bestimmt und mit exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik nach verschiedenen Quenchprotokollen verglichen, durch die die Stärke des Transversalfeldes, die Anisotropie oder beide Parameter des Hamiltonoperators geändert wurden. Hierbei zeigte sich eine gute Übereinstimmung der Resultate der semiklassischen Rechnung zu den exakten Resultaten, die sich im Falle der lokalen Magnetisierung und der gleichzeitigen Korrelationsfunktion jedoch mit zunehmender Quenchstärke und kleiner werdender Anisotropie verschlechterte. Die Resultate der semiklassischen Theorie konnten dadurch verbessert werden, dass aus einer Verallgemeinerung der exakten Resultate von Calabrese, Essler und Fagotti aus [44, 47] für das transversale Ising-Modell im thermodynamischen Limes auf das transversale XY-Modell phänomenologisch eine modifizierte Besetzungszahl gewonnen wurde. Auf diese Weise konnten auch sich aus der endlichen Systemgröße ergebende Finite-Size-Effekte in der Zeitentwicklung der Observablen mit hoher Genauigkeit reproduziert werden. Im Hinblick auf die Untersuchungen des stationären Zustandes des transversalen Ising- und XY-Modells in einer Dimension war aufgrund der Integrierbarkeit beider Modelle a priori klar, dass sie nicht thermalisieren können. Die Untersuchungen mithilfe der semiklassischen Theorie haben jedoch gezeigt, dass ihr stationärer Zustand durch das verallgemeinerte Gibbs-Ensemble beschrieben werden kann, welches neben der Gesamtenergie auch die zusätzlichen Erhaltungsgrößen des Systems berücksichtigt. Diese können dabei über die unter der unitären Zeitentwicklung erhaltenen Besetzungszahlen der Quasiteilchen ausgedrückt werden, wobei nach dem Quench jeder Mode eine eigene effektive Temperatur zugewiesen wird entgegen der einzelnen effektiven Temperatur im Falle von Thermalisierung und der Anwendbarkeit des kanonischen Gibbs-Ensembles. Die genannten Resultate wurden für das System mit freien Randbedingungen in [68] veröffentlicht. Darüber hinaus erfolgte im Rahmen der Dissertation eine Diskussion des Modells auch mit periodischen Randbedingungen. Weiterhin wurde ebenfalls im Rahmen der Dissertation eine Erweiterung der semiklassischen Beschreibung des Relaxationsprozesses auf kompliziertere Quenchprotokolle beschrieben. Konkret wurde dabei die Umkehrung des Quenchs zu einem späteren Zeitpunkt betrachtet, ein sogenannter Rückquench. Durch diesen werden die Parameter des Hamiltonoperators wieder auf ihre Anfangswerte zurückgesetzt. Es konnten sowohl Ausdrücke für die Besetzungszahl der Quasiteilchen nach dem Rückquench hergeleitet werden als auch exakte Ausdrücke für die Zeitentwicklung der Magnetisierung und der Korrelationsfunktionen im thermodynamischen Limes, aus denen wiederum eine modifizierte Besetzungszahl der Quasiteilchen extrahiert werden konnte. Mithilfe dieser modifizierten Besetzungszahl war im Rahmen der semiklassischen Theorie eine gute Beschreibung der Zeitentwicklung der lokalen Magnetisierung des Systems auch nach dem Rückquench möglich, wobei jedoch für endliche Systeme aufgrund des unbekanntes Einflusses des Rückquenchs auf die durch den ersten Quench erzeugten Quasiteilchen und die Verschränkung zwischen ihnen Finite-Size-Effekte nicht korrekt beschrieben werden konnten. Aus dem gleichen Grund konnte nach dem Rückquench auch die Verschränkungsentropie zwischen Subsystemen nicht bestimmt werden. Das Ziel zukünftiger Untersuchungen am transversalen Ising- und XY-Modell unter Verwendung der semiklassischen Theorie sollte daher darin bestehen, den Einfluss eines zweiten Quenchs auf die Verschränkung und Besetzungszahl der beim ersten Quench erzeugten Quasiteilchen zu bestimmen. Nach den bisherigen Überlegungen ist nur die Gesamtbesetzungszahl der Quasiteilchen nach dem zweiten Quench bekannt. Die Lösung dieser Fragestellung würde das Verständnis von Verschränkung in quantenmechanischen Systemen entscheidend voranbringen und es erlauben, auch bei beliebig komplizierten Quenchprotokollen die in endlichen Systemen durch die Wiederkehr von Quasiteilchen für hinreichend große Zeiten hervorgerufenen Finite-Size-Effekte zu beschreiben und die Zeitentwicklung aller Observablen einschließlich der Verschränkungsentropie von Subsystemen korrekt zu bestimmen.

Zweidimensionales transversales Ising-Modell

Im Gegensatz zum eindimensionalen transversalen Ising- und XY-Modell ist das zweidimensionale transversale Ising-Modell nichtintegabel und kann nicht analytisch gelöst werden durch Transformation auf ein System freier Fermionen. Aufgrund der Nichtintegabilität des Systems ist lediglich seine Gesamtenergie unter unitärer Zeitentwicklung erhalten, sodass die Möglichkeit besteht, dass das System nach einem Quench thermalisiert. Da jedoch aus der Nichtintegabilität eines Systems nicht zwangsweise das Auftreten von Thermalisierung folgt, handelte es sich bei der Untersuchung, ob Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell tatsächlich beobachtet werden kann, um eines der zentralen Elemente der vorliegenden Dissertation. Die Grundlage der Untersuchungen bildete ein auf Variations-Monte-Carlo in Realzeit basierendes Verfahren, das mit geeignet gewählten Ansatzfunktionen eine Beschreibung der Zeitentwicklung des Zustandes des Systems mit hoher Genauigkeit über lange Zeitintervalle hinweg für mithilfe exakter Diagonalisierung nicht erreichbare Systemgrößen erlaubte. Betrachtet wurden verschiedene Observablen wie Magnetisierung und Korrelationsfunktionen nach Wechselwirkungsquenches in der paramagnetischen Phase und nach Feldquenches in der ferromagnetischen Phase. Durch das Variations-Monte-Carlo-Verfahren reduzierte sich die Anzahl der für die Zeitentwicklung des Systems zu berücksichtigenden Parameter auf eine Anzahl, die algebraisch mit der Systemgröße anwächst entgegen dem exponentiellen Wachstum der Dimension des Hilbertraumes mit der Systemgröße. Zudem erlaubte das Verfahren die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren. Um die Frage nach dem Auftreten von Thermalisierung zu beantworten, wurden die Zeitmittelwerte der Observablen nach den Quenches sowie die zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit denjenigen eines System im thermischen Gleichgewicht gemäß dem kanonischen Gibbs-Ensemble bei der über die Exzessenergie im System nach dem Quench bestimmten Temperatur verglichen. Die Erwartungswerte der Observablen für das thermische System wurden mithilfe eines Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus in kontinuierlicher Imaginärzeit bestimmt. Durch Betrachtung verschiedener Systemgrößen wurden die Resultate mithilfe von Finite-Size-Scaling auf das System im thermodynamischen Limes extrapoliert. Das zentrale Ergebnis der Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell bestand darin, dass das System nach den Wechselwirkungsquenches in der paramagnetischen Phase thermalisiert, während nach den Feldquenches in der ferromagnetischen Phase Abweichungen auftreten, die auch im thermodynamischen Limes nicht verschwinden. Diese Abweichungen nehmen mit der Quenchstärke zu und zeigen sich besonders deutlich in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte der die Observablen beschreibenden Operatoren. Die Thermalisierung des Systems in der paramagnetischen Phase steht dabei in Übereinstimmung mit dem exakten Theorem von Doyon zum Auftreten verallgemeinerter Thermalisierung in quantenmechanischen Vielteilchensystem [185] sowie den Ergebnissen von Mondaini *et al.* auf Grundlage der ETH [171]. In der ferromagnetischen Phase hingegen kann das Theorem von Doyon nicht angewendet werden und auch die ETH trifft hier keine Aussagen. Die beschriebenen Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell wurde in [61] veröffentlicht. Im Rahmen der vorliegenden Dissertation wurde darüber hinaus noch untersucht, welchen Einfluss die Beschränkung der Betrachtungen auf ein Subsystem nach den Feldquenches in der ferromagnetischen Phase hat. Hierbei konnte zwar eine Verbesserung der Übereinstimmung der Zeitmittelwerte für das System nach den Feldquenches und der Erwartungswerte der Observablen für das System im thermischen Gleichgewicht festgestellt werden, jedoch bestanden weiterhin Abweichungen zwischen den Wahrscheinlichkeitsverteilungen, sodass auch bei Beschränkung auf Subsysteme nach den Feldquenches in der ferromagnetischen Phase keine vollständige Thermalisierung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells beobachtet wird. Zukünftige Untersuchungen zum Auftreten von Thermalisierung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell sollten darauf abzielen, die Abweichungen zwischen den zeitlichen Mittelwerten und den thermischen Erwartungswerten für das System nach den Feldquenches in der ferromagnetischen Phase zu erklären. Es ist jedoch davon auszugehen, dass sich die langreichweitige ferromagnetische Ordnung des Systems als für die Abweichungen von thermischem Verhalten relevant erweisen wird.

Neben der Untersuchung zum Auftreten von Thermalisierung wurde im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell in Zusammenarbeit mit Jonas Hafner auch die Ausbreitung einer lokalen Störung untersucht. Um größere Systeme sowie einen inhomogenen Anfangszustand betrachten zu können, wurde hierzu ein Verfahren auf Grundlage zeitabhängiger Mean-Field-Theorie in erster und zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie verwendet. Mithilfe dieses Verfahrens konnte die Ausbreitung einer anfänglich lokalen Störung tief in der ferromagnetischen Phase für $h/J \leq 0.6$ beschrieben werden. Dabei haben sich zwei wesentliche

Erkenntnisse ergeben: Während die Gitterstruktur für kleine Abstände einen starken Einfluss auf die Ausbreitung der Störung hat, der sich in einer Ausbreitung gemäß der Manhattan-Metrik äußert, nähert sich die Form der Wellenfront für große Abstände immer mehr einem Kreis an, d. h. für große Abstände tritt die Gitterstruktur zunehmend in den Hintergrund und die Ausbreitung der Störung erfolgt wie in einem Kontinuum der euklidischen Metrik entsprechend. Das zweite zentrale Ergebnis der Untersuchungen zur Ausbreitung der Störung durch das System betrifft ihre Geschwindigkeit. Während im eindimensionalen System in der ferromagnetischen Phase die Ausbreitungsgeschwindigkeit linear mit der Stärke des Transversalfeldes anwächst, hat sich für die betrachteten Werte von h und J in der ferromagnetischen Phase für das zweidimensionale transversale Ising-Modell eine quadratische Abhängigkeit der Geschwindigkeit vom Transversalfeld ergeben. Diese Beobachtung konnte mithilfe von Ergebnissen der Spinwellentheorie erklärt werden. Zudem konnte ausgehend von der Spinwellentheorie ebenfalls gefolgert werden, dass die quadratische Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Feldstärke für kleine Verhältnisse h/J tief in der ferromagnetischen Phase für alle Dimensionen $d > 1$ Bestand haben sollte. Anschaulich konnte die bedeutend geringere Geschwindigkeit der Störung im zweidimensionalen transversalen Ising-Modell im Vergleich zum eindimensionalen System dadurch erklärt werden, dass mit der Ausbreitung der Störung im zweidimensionalen System immer die Erzeugung von Kinks verbunden ist, da die Grenzfläche der Störung bei ihrer Ausbreitung wächst. Eine größere Anzahl an Kinks ist in der ferromagnetischen Phase jedoch energetisch ungünstig. Die genannten Resultate für die Ausbreitung einer lokalen Störung im transversalen Ising-Modell in zwei Dimensionen wurden in [62] veröffentlicht. Zukünftige Studien stehen vor der Aufgabe, den Parameterbereich, in dem die Ausbreitung der lokalen Störung beschrieben werden kann, zu größeren Transversalfeldern h zu erweitern. Hierbei ist zu klären, ob die quadratische Abhängigkeit der Geschwindigkeit vom Transversalfeld auch für größere Werte von h in der ferromagnetischen Phase erhalten bleibt und ob die Geschwindigkeit wie im Falle des eindimensionalen transversalen Ising- und XY-Modells in der paramagnetischen Phase einen konstanten Wert erreicht. Erste Ergebnisse hierzu liegen bereits vor, jedoch wurden diese wie die in der vorliegenden Dissertation präsentierten Resultate ebenfalls mithilfe von zeitabhängiger Mean-Field-Theorie in erster bzw. zweiter Ordnung BBGKY-Hierarchie bestimmt, sodass nicht klar ist, inwieweit sie die Zeitentwicklung des Systems korrekt beschreiben.

Danksagung

Zum Abschluss meiner Dissertation möchte ich den Menschen danken, die mich während meiner Promotion direkt oder indirekt unterstützt haben.

Beginnen möchte ich mit meinem Doktorvater Professor Dr. Dr. h.c. Heiko Rieger, der es mir ermöglicht hat, das Thema meiner Diplomarbeit im Rahmen meiner Promotion fortzuführen. Er hat meine Arbeit die gesamte Zeit über mit großem Interesse verfolgt und war für Fragen immer erreichbar. Dabei hat er mit seinen fachkundigen Auskünften und Anregungen der Dissertation wiederholt Impulse in neue, interessante Richtungen gegeben. Seine Unterstützung und die Weitergabe seiner Erfahrungen bei der Veröffentlichung der im Rahmen meiner Forschungen gewonnenen Resultate in wissenschaftlichen Fachzeitschriften war ebenfalls von großer Bedeutung für das Gelingen meiner Dissertation. Trotz alledem hat er mir jedoch auch immer die notwendige Freiheit gelassen, um eigenen Forschungsinteressen nachzugehen und eigene wissenschaftliche Ziele zu verfolgen.

Frau Balzert, der Sekretärin unserer Arbeitsgruppe, möchte ich meinen Dank dafür aussprechen, dass sie sich immer mit großer Sorgfalt um die vertragliche Situation aller Doktoranden des Lehrstuhls gekümmert hat, was es mir und meinen Mitdoktoranden ermöglicht hat, uns ganz der wissenschaftlichen Forschung ohne Sorgen um unsere finanzielle Situation zu widmen. Zudem hatte sie immer ein offenes Ohr für die Doktoranden und hat mit ihrer freundlichen Art entscheidend zum guten Klima in der Arbeitsgruppe beigetragen.

Weiterhin gebührt mein Dank den Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe. Das in den gemeinsamen Jahren am Lehrstuhl entstandene gute Verhältnis untereinander und die daraus erwachsenen Freundschaften bedeuten mir viel und haben entscheidend zu dem guten, produktiven Arbeitsklima beigetragen, dessen Bedeutung für den erfolgreichen Abschluss meiner Promotion nicht zu unterschätzen ist. Für ihre Unterstützung zum wissenschaftlichen Gelingen meiner Dissertation möchte ich besonders Karsten Schwarz, Benjamin Bogner, André Winter und Jonas Hafner hervorheben. Die fachlichen Diskussionen mit ihnen waren immer sehr ergiebig und haben einen Quell neuer Ideen dargestellt. Karsten Schwarz war dabei mit seinen Kenntnissen zu mathematischen und methodischen Grundlagen eine große Hilfe. Benjamin Bogner und André Winter möchte für die Unterstützung mit ihrem Fachwissen zur Quantenmechanik danken. Insbesondere ihre Kenntnisse in Bezug auf statistische Physik, die zur Untersuchung des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells im thermischen Gleichgewicht erforderlich war, haben mir sehr geholfen. Jonas Hafner fertigte während meiner Promotion sowohl seine Bachelor- als auch seine Masterarbeit am Lehrstuhl von Prof. Rieger an, während derer er sich ebenfalls mit der Nichtgleichgewichtsdynamik des transversalen Ising-Modells befasste. Habe ich ihn zu Beginn noch bei seiner Einarbeitung in das Thema unterstützt, so hat er sich im Laufe der Zeit mit Zunahme seiner Kenntnisse auf dem Gebiet zu einem fachkundigen Diskussionspartner entwickelt, der viele gute Ideen in die Forschung eingebracht hat, woraus auch eine gemeinsame Veröffentlichung entstanden ist. Für die Hilfe beim Korrekturlesen meiner Arbeit möchte ich Karsten Schwarz, Benjamin Bogner und Anne Hafner danken.

Abschließend möchte ich meiner Familie und hier insbesondere meinen Eltern danken. Sie haben mich während meiner gesamten Zeit an der Universität und auch schon mein gesamtes Leben davor in allen Belangen unterstützt und mir ermöglicht, mich voll und ganz auf mein Studium zu konzentrieren. Dafür möchte ich ihnen noch einmal meinen herzlichsten Dank aussprechen.

Literatur

- [1] W. Heisenberg
Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen
Z. Phys. **33**, 879 (1925)
- [2] M. Born und P. Jordan
Zur Quantenmechanik
Z. Phys. **34**, 858 (1925)
- [3] M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan
Zur Quantenmechanik II
Z. Phys. **35**, 557 (1926)
- [4] E. Schrödinger
Quantisierung als Eigenwertproblem I
Ann. Phys. (Berlin) **79**, 361 (1926)
- [5] E. Schrödinger
Quantisierung als Eigenwertproblem II
Ann. Phys. (Berlin) **79**, 489 (1926)
- [6] E. Schrödinger
Quantisierung als Eigenwertproblem III
Ann. Phys. (Berlin) **80**, 437 (1926)
- [7] E. Schrödinger
Quantisierung als Eigenwertproblem IV
Ann. Phys. (Berlin) **81**, 109 (1926)
- [8] R. P. Feynman
Simulating physics with computers
Int. J. Theor. Phys. **21**, 467 (1982)
- [9] D. Deutsch
Quantum-theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer
Proc. R. Soc. Lond. A **400**, 97 (1985)
- [10] D. Deutsch und R. Jozsa
Rapid solution of problems by quantum computation
Proc. R. Soc. Lond. A **439**, 553 (1992)
- [11] R. Cleve, A. Ekert, C. Macchiavello und M. Mosca
Quantum algorithms revisited
Proc. R. Soc. Lond. A **454**, 339 (1998)
- [12] P. W. Shor
Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring
IEEE Symposium on Foundations of Computer Science 1994, 124
- [13] L. K. Grover
A fast quantum mechanical algorithm for database search
Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing 1996, 212
- [14] L. K. Grover
Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack
Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997)
- [15] L. K. Grover
From Schrödinger's equation to the quantum search algorithm
J. Phys. **56** (2001) 333

- [16] I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen, X. Zhou, D. W. Leung und S. Lloyd
Experimental realization of a quantum algorithm
Nature **393**, 143 (1998)
- [17] I. L. Chuang, N. Gershenfeld und M. Kubinec
Experimental implementation of fast quantum searching
Phys. Rev. Lett. **80**, 3408 (1998)
- [18] J. A. Jones und M. Mosca
Implementation of a quantum algorithm on a nuclear magnetic resonance quantum computer
J. Chem. Phys. **109** (1998) 1648
- [19] J. A. Jones, M. Mosca und R. H. Hansen
Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer
Nature **393**, 344 (1998)
- [20] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta¹, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood und I. L. Chuang
Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance
Nature **414**, 883 (2001)
- [21] J. I. Cirac und P. Zoller
Quantum computations with cold trapped ions
Phys. Rev. Lett. **74**, 4091 (1995)
- [22] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano und D. J. Wineland
Demonstration of a fundamental quantum logic gate
Phys. Rev. Lett. **75**, 4714 (1995)
- [23] S. Gulde, M. Riebe, G. P. T. Lancaster, C. Becher, J. Eschner, H. Häffner, F. Schmidt-Kaler, I. L. Chuang und R. Blatt
Implementation of the Deutsch-Jozsa algorithm on an ion-trap quantum computer
Nature **421**, 48 (2003)
- [24] K.-A. Brickman, P. C. Haljan, P. J. Lee, M. Acton, L. Deslauriers und C. Monroe
Implementation of Grover's quantum search algorithm in a scalable system
Phys. Rev. A **72**, 050306(R) (2005)
- [25] H. Häffner, W. Hänsel, C. F. Roos, J. Benhelm, D. Chek-al-kar, M. Chwalla, T. Körber, U. D. Rapol, M. Riebe¹, P. O. Schmidt, C. Becher, O. Gühne, W. Dür und R. Blatt
Scalable multiparticle entanglement of trapped ions
Nature **438**, 643 (2005)
- [26] C. Ospelkaus, U. Warring, Y. Colombe, K. R. Brown, J. M. Amini, D. Leibfried und D. J. Wineland
Microwave quantum logic gates for trapped ions
Nature **476**, 181 (2011)
- [27] L. DiCarlo, J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. S. Bishop, B. R. Johnson, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, L. Frunzio, S. M. Girvin und R. J. Schoelkopf
Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor
Nature **460**, 240 (2009)
- [28] A. Politi, J. C. F. Matthews, J. L. O'Brien
Shor's Quantum Factoring Algorithm on a Photonic Chip
Science **325** (5945), 1221 (2009)
- [29] M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk, E. M. Chapple, C. Enderud, J. P. Hilton, K. Karimi, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Oh, I. Perminov, C. Rich, M. C. Thom, E. Tolkacheva, C. J. S. Truncik, S. Uchaikin, J. Wang, B. Wilson und G. Rose
Quantum annealing with manufactured spins
Nature **473**, 194 (2011)

-
- [30] F. Iglói und H. Rieger
Random transverse Ising spin chain and random walks
Phys. Rev. B **57**, 11404 (1998)
- [31] F. Iglói, Róbert Juhász und H. Rieger
Random antiferromagnetic quantum spin chains: Exact results from scaling of rare regions
Phys. Rev. B **61**, 11552 (2000)
- [32] F. Iglói und H. Rieger
Long-Range Correlations in the Nonequilibrium Quantum Relaxation of a Spin Chain
Phys. Rev. Lett. **85**, 3233 (2000)
- [33] P. Calabrese und J. Cardy
Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2006) P04010
- [34] P. Calabrese und J. Cardy
Time Dependence of Correlation Functions Following a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **96**, 136801 (2006)
- [35] P. Calabrese und J. Cardy
Quantum quenches in extended systems
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2007) P06008
- [36] F. Iglói und R. Juhász
Exact relationship between the entanglement entropies of XY and quantum Ising chains
EPL, **81** (2008) 57003
- [37] F. Iglói und Y.-C. Lin
Finite-size scaling of the entanglement entropy of the quantum Ising chain with homogeneous, periodically modulated and random couplings
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2008) P06004
- [38] A. Silva
Statistics of the Work Done on a Quantum Critical System by Quenching a Control Parameter
Phys. Rev. Lett. **101**, 120603 (2008)
- [39] D. Rossini, A. Silva, G. Mussardo und G. Santoro
Effective Thermal Dynamics Following a Quantum Quench in a Spin Chain
Phys. Rev. Lett. **102**, 127204 (2009)
- [40] F. Iglói, Z. Sztalmari und Y.-C. Lin
Entanglement entropy with localized and extended interface defects
Phys. Rev. B **80**, 024405 (2009)
- [41] D. Rossini, S. Suzuki, G. Mussardo, G. E. Santoro und A. Silva
Long time dynamics following a quench in an integrable quantum spin chain:
Local versus nonlocal operators and effective thermal behavior
Phys. Rev. B **82**, 144302 (2010)
- [42] R. Ng und E. S. Sørensen
Exact real-time dynamics of quantum spin systems using the positive-P representation
J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 065305 (2011)
- [43] F. Iglói und H. Rieger
Quantum Relaxation after a Quench in Systems with Boundaries
Phys. Rev. Lett. **106**, 035701 (2011)
- [44] P. Calabrese, F. H. L. Essler und M. Fagotti
Quantum Quench in the Transverse-Field Ising Chain
Phys. Rev. Lett. **106**, 227203 (2011)
-

- [45] H. Rieger und F. Iglói
Semiclassical theory for quantum quenches in finite transverse Ising chains
Phys. Rev. B **84**, 165117 (2011)
- [46] L. Foini, L. F. Cugliandolo und A. Gambassi
Fluctuation-dissipation relations and critical quenches in the transverse field Ising chain
Phys. Rev. B **84**, 212404 (2011)
- [47] P. Calabrese, F. H. L. Essler und M. Fagotti
Quantum quench in the transverse field Ising chain: I. Time evolution of order parameter correlators
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2012) P07016
- [48] P. Calabrese, F. H. L. Essler und M. Fagotti
Quantum quenches in the transverse field Ising chain: II. Stationary state properties
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2012) P07022
- [49] F. H. L. Essler, S. Evangelisti und M. Fagotti
Dynamical Correlations After a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **109**, 247206 (2012)
- [50] M. Heyl, A. Polkovnikov und S. Kehrein
Dynamical Quantum Phase Transitions in the Transverse-Field Ising Model
Phys. Rev. Lett. **110**, 135704 (2013)
- [51] J. S. Caux und F. H. L. Essler
Time Evolution of Local Observables After Quenching to an Integrable Model
Phys. Rev. Lett. **110**, 257203 (2013)
- [52] R. Ng, E. S. Sørensen und P. Deuar
Simulation of the dynamics of many-body quantum spin systems using phase-space techniques
Phys. Rev. B **88**, 144304 (2013)
- [53] M. Marcuzzi, J. Marino, A. Gambassi und A. Silva
Prethermalization in a Nonintegrable Quantum Spin Chain after a Quench
Phys. Rev. Lett. **111**, 197203 (2013)
- [54] P. Hauke und L. Tagliacozzo
Spread of Correlations in Long-Range Interacting Quantum Systems
Phys. Rev. Lett. **111**, 207202 (2013)
- [55] L. Bucciantini, M. Kormos und P. Calabrese
Quantum quenches from excited states in the Ising chain
J. Phys. A: Math. Theor. **47** (2014) 175002
- [56] M. Heyl
Scaling and Universality at Dynamical Quantum Phase Transitions
Phys. Rev. Lett. **115**, 140602 (2015)
- [57] A. J. A. James und R. M. Konik
Quantum quenches in two spatial dimensions using chain array matrix product states
Phys. Rev. B **92**, 161111(R) (2015)
- [58] L. Cevolani, G. Carleo und L. Sanchez-Palencia
Protected quasilocality in quantum systems with long-range interactions
Phys. Rev. A **92**, 041603(R) (2015)
- [59] P. Navez, G. Tsironis und A. Zagoskin
Propagation of quantum fluctuations in quantum Ising model
Phys. Rev. B **95**, 064304 (2017)

-
- [60] L. Cevolani, G. Carleo und L. Sanchez-Palencia
Spreading of correlations in exactly-solvable quantum models with long-range interactions in arbitrary dimensions
New J. Phys. **18** (2016) 093002
- [61] B. Blaß und H. Rieger
Test of quantum thermalization in the two-dimensional transverse-field Ising model
Sci. Rep. **6**, 38185 (2016)
- [62] J. Hafner, B. Blaß und H. Rieger
Light cone in the two-dimensional transverse-field Ising model in time-dependent mean-field theory
EPL, **116** (2016) 60002
- [63] E. Barouch, B. M. McCoy und M. Dresden
Statistical Mechanics of the XY Model. I
Phys. Rev. A **2**, 1075 (1970)
- [64] E. Barouch und B. M. McCoy
Statistical Mechanics of the XY Model. II
Spin-Correlation Functions
Phys. Rev. A **3**, 786 (1971)
- [65] E. Barouch und B. M. McCoy
Statistical Mechanics of the XY Model. III
Phys. Rev. A **3**, 2137 (1971)
- [66] B. M. McCoy, E. Barouch und D. B. Abraham
Statistical Mechanics of the XY Model. IV
Time-Dependent Spin-Correlation Functions
Phys. Rev. A **4**, 2331 (1971)
- [67] M. Fagotti und P. Calabrese
Evolution of entanglement entropy following a quantum quench: Analytic results for the XY chain in a transverse magnetic field
Phys. Rev. A **78**, 010306 (2008)
- [68] B. Blaß, H. Rieger und F. Iglói
Quantum relaxation and finite-size effects in the XY chain in a transverse field after global quenches
EPL, **99** (2012) 30004
- [69] V. Eisler, F. Iglói und I. Peschel
Entanglement in spin chains with gradients
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2009) P02011
- [70] P. Barmettler, M. Punk, V. Gritsev, E. Demler und E. Altman
Relaxation of Antiferromagnetic Order in Spin-1/2 Chains Following a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **102**, 130603 (2009)
- [71] P. Barmettler, M. Punk, V. Gritsev, E. Demler und E. Altman
Quantum quenches in the anisotropic spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain: different approaches to many-body dynamics far from equilibrium
New J. Phys. **12** (2010) 093002
- [72] B. Pozsgay
The generalized Gibbs ensemble for Heisenberg spin chains
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2013) P07003
- [73] M. Fagotti, M. Collura, F. H. L. Essler und P. Calabrese
Relaxation after quantum quenches in the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg XXZ chain
Phys. Rev. B **89**, 125101 (2014)
-

- [74] B. Wouters, J. De Nardis, M. Brockmann, D. Fioretto, M. Rigol und J.-S. Caux
Quenching the Anisotropic Heisenberg Chain: Exact Solution and Generalized Gibbs Ensemble Predictions
Phys. Rev. Lett. **113**, 117202 (2014)
- [75] B. Pozsgay, M. Mestyán, M. A. Werner, M. Kormos, G. Zaránd und G. Takács
Correlations after Quantum Quenches in the XXZ Spin Chain: Failure of the Generalized Gibbs Ensemble
Phys. Rev. Lett. **113**, 117203 (2014)
- [76] B. Pozsgay
Failure of the generalized eigenstate thermalization hypothesis in integrable models with multiple particle species
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2014) P09026
- [77] G. Goldstein und N. Andrei
Failure of the local generalized Gibbs ensemble for integrable models with bound states
Phys. Rev. A **90**, 043625 (2014)
- [78] L. Bonnes, F. H. L. Essler und A. M. Läuchli
"Light-Cone" Dynamics After Quantum Quenches in Spin Chains
Phys. Rev. Lett. **113**, 187203 (2014)
- [79] M. Brockmann, B. Wouters, D. Fioretto, J. D. Nardis, R. Vlijm und J. S. Caux
Quench action approach for releasing the Néel state into the spin-1/2 XXZ chain
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2014) P12009
- [80] M. Mestyán, B. Pozsgay, G. Takács und M. A. Werner
Quenching the XXZ spin chain: quench action approach versus generalized Gibbs ensemble
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2015) P04001
- [81] R. Steinigeweg, J. Gemmer und W. Brenig
Spin and energy currents in integrable and nonintegrable spin- $\frac{1}{2}$ chains: A typicality approach to real-time autocorrelations
Phys. Rev. B **91**, 104404 (2015)
- [82] M. Moeckel und S. Kehrein
Interaction Quench in the Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **100**, 175702 (2008)
- [83] M. Moeckel, S. Kehrein
Real-time evolution for weak interaction quenches in quantum systems
Ann. Phys. **324**, 2146 (2009)
- [84] M. Eckstein, M. Kollar und P. Werner
Thermalization after an Interaction Quench in the Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **103**, 056403 (2009)
- [85] M. Schiró und M. Fabrizio
Time-Dependent Mean Field Theory for Quench Dynamics in Correlated Electron Systems
Phys. Rev. Lett. **105**, 076401 (2010)
- [86] M. Kollar, F. A. Wolf, and M. Eckstein
Generalized Gibbs ensemble prediction of prethermalization plateaus and their relation to nonthermal steady states in integrable systems
Phys. Rev. B **84**, 054304 (2011)
- [87] N. Tsuji, M. Eckstein und P. Werner
Nonthermal Antiferromagnetic Order and Nonequilibrium Criticality in the Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **110**, 136404 (2013)

-
- [88] S. A. Hamerla und G. S. Uhrig
Dynamical transition in interaction quenches of the one-dimensional Hubbard model
Phys. Rev. B **87**, 064304 (2013)
- [89] S. A. Hamerla und G. S. Uhrig
One-dimensional fermionic systems after interaction quenches and their description by bosonic field theories
New J. Phys. **15** (2013) 073012
- [90] S. A. Hamerla und G. S. Uhrig
Interaction quenches in the two-dimensional fermionic Hubbard model
Phys. Rev. B **89**, 104301 (2014)
- [91] C. Kollath, A. M. Läuchli und E. Altman
Quench Dynamics and Nonequilibrium Phase Diagram of the Bose-Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **98**, 180601 (2007)
- [92] M. Cramer, C. M. Dawson, J. Eisert und T. J. Osborne
Exact Relaxation in a Class of Nonequilibrium Quantum Lattice Systems
Phys. Rev. Lett. **100**, 030602 (2008)
- [93] M. Cramer, A. Flesch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck und J. Eisert
Exploring Local Quantum Many-Body Relaxation by Atoms in Optical Superlattices
Phys. Rev. Lett. **101**, 063001 (2008)
- [94] G. Roux
Quenches in quantum many-body systems: One-dimensional Bose-Hubbard model reexamined
Phys. Rev. A **79**, 021608(R) (2009)
- [95] G. Roux
Finite-size effects in global quantum quenches: Examples from free bosons in an harmonic trap and the one-dimensional Bose-Hubbard model
Phys. Rev. A **81**, 053604 (2010)
- [96] B. Sciolla and G. Biroli
Quantum Quenches and Off-Equilibrium Dynamical Transition in the Infinite-Dimensional Bose-Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **105**, 220401 (2010)
- [97] A. C. Cassidy, C. W. Clark und M. Rigol
Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System
Phys. Rev. Lett. **106**, 140405 (2011)
- [98] G. Carleo, F. Becca, M. Schiró und M. Fabrizio
Localization and Glassy Dynamics Of Many-Body Quantum Systems
Sci. Rep. **2**, 243 (2012)
- [99] G. Carleo, F. Becca, L. Sanchez-Palencia, S. Sorella und M. Fabrizio
Light-cone effect and supersonic correlations in one- and two-dimensional bosonic superfluids
Phys. Rev. A **89**, 031602(R) (2014)
- [100] K. Krutitsky, P. Navez, F. Queisser und R Schützhold
Propagation of quantum correlations after a quench in the Mott-insulator regime of the Bose-Hubbard model
EPJ Quantum Technology 2014, 1:12
- [101] S. Sorg, L. Vidmar, L. Pollet und F. Heidrich-Meisner
Relaxation and thermalization in the one-dimensional Bose-Hubbard model: A case study for the interaction quantum quench from the atomic limit
Phys. Rev. A **90**, 033606 (2014)
-

- [102] H. U. R. Strand, M. Eckstein und P. Werner
Nonequilibrium Dynamical Mean-Field Theory for Bosonic Lattice Models
Phys. Rev. X **5**, 011038 (2015)
- [103] M. A. Cazalilla
Effect of Suddenly Turning on Interactions in the Luttinger Model
Phys. Rev. Lett. **97**, 156403 (2006)
- [104] A. Iucci und M. A. Cazalilla
Quantum quench dynamics of the Luttinger model
Phys. Rev. A **80**, 063619 (2009)
- [105] A. Iucci und M. A. Cazalilla
Quantum quench dynamics of the sine-Gordon model in some solvable limits
New. J. Phys. **12** (2010) 055019
- [106] M. Rigol, A. Muramatsu und M. Olshanii
Hard-core bosons on optical superlattices: Dynamics and relaxation in the superfluid and insulating regimes
Phys. Rev. A **74**, 053616 (2006)
- [107] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky und M. Olshanii
Relaxation in a Completely Integrable Many-Body Quantum System: An Ab Initio Study of the Dynamics of the Highly Excited States of 1D Lattice Hard-Core Bosons
Phys. Rev. Lett. **98**, 050405 (2007)
- [108] M. Rigol, V. Dunjko und M. Olshanii
Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems
Nature **452**, 854 (2008)
- [109] M. Rigol
Breakdown of Thermalization in Finite One-Dimensional Systems
Phys. Rev. Lett. **103**, 100403 (2009)
- [110] M. Rigol und L. F. Santos
Quantum chaos and thermalization in gapped systems
Phys. Rev. A **82**, 011604(R) (2010)
- [111] E. Khatami, G. Pupillo, M. Srednicki und M. Rigol
Fluctuation-Dissipation Theorem in an Isolated System of Quantum Dipolar Bosons after a Quench
Phys. Rev. Lett. **111**, 050403 (2013)
- [112] S. R. Manmana, S. Wessel, R. M. Noack und A. Muramatsu
Strongly Correlated Fermions after a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **98**, 210405 (2007)
- [113] M. Rigol
Quantum quenches and thermalization in one-dimensional fermionic systems
Phys. Rev. A **80**, 053607 (2009)
- [114] S. Sotiriadis, P. Calabrese und J. Cardy
Quantum quench from a thermal initial state
EPL, **87** (2009) 20002
- [115] M. Eckstein und M. Kollar
Nonthermal Steady States after an Interaction Quench in the Falicov-Kimball Model
Phys. Rev. Lett. **100**, 120404 (2008)
- [116] A. Gambassi und P. Calabrese
Quantum quenches as classical critical films
EPL, **95** (2011) 66007

-
- [117] K. He, L. F. Santos, T. M. Wright und M. Rigol
Single-particle and many-body analyses of a quasiperiodic integrable system after a quench
Phys. Rev. A **87**, 063637 (2013)
- [118] B. Pozsgay
Quantum quenches and generalized Gibbs ensemble in a Bethe Ansatz solvable lattice model of interacting bosons
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2014) P10045
- [119] R. Geiger, T. Langen, I. E. Mazets und J. Schmiedmayer
Local relaxation and light-cone-like propagation of correlations in a trapped one-dimensional Bose gas
New J. Phys. **16** (2014) 053034
- [120] S. Sotiriadis und J. Cardy
Quantum quench in interacting field theory: A self-consistent approximation
Phys. Rev. B **81**, 134305 (2010)
- [121] D. Fioretto and G. Mussardo
Quantum quenches in integrable field theories
New. J. Phys. **12** (2010) 055015
- [122] G. Mussardo
Infinite-Time Average of Local Fields in an Integrable Quantum Field Theory After a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **111**, 100401 (2013)
- [123] A. Chiocchetta, M. Tavora, A. Gambassi und A. Mitra
Short-time universal scaling in an isolated quantum system after a quench
Phys. Rev. B **91**, 220302(R) (2015)
- [124] A. Maraga, A. Chiocchetta, A. Mitra und A. Gambassi
Aging and coarsening in isolated quantum systems after a quench: Exact results for the quantum $O(N)$ model with $N \rightarrow \infty$
Phys. Rev. E **92**, 042151 (2015)
- [125] A. Chiocchetta, M. Tavora, A. Gambassi und A. Mitra
Short-time universal scaling and light-cone dynamics after a quench in an isolated quantum system in d spatial dimensions
Phys. Rev. B **94**, 134311 (2016)
- [126] M. Eckstein, A. Hackl, S. Kehrein, M. Kollar, M. Moeckel, P. Werner und F.A. Wolf
New theoretical approaches for correlated systems in nonequilibrium
Eur. Phys. J. Special Topics **180**, 217 (2010)
- [127] A. Polkovnikov, K. Sengupta A. Silva und M. Vengalattore
Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems
Rev. Mod. Phys. **83**, 863 (2011)
- [128] F. H. L. Essler und M. Fagotti
Quench dynamics and relaxation in isolated integrable quantum spin chains
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2016) P064002
- [129] D. Porras und J. I. Cirac
Effective quantum spin systems with trapped ions
Phys. Rev. Lett. **92**, 207901 (2004)
- [130] H. Friedenauer, H. Schmitz, J. Glueckert, D. Porras und T. Schaetz
Simulating a quantum magnet with trapped ions
Nature Phys. **4**, 757 (2008)
-

- [131] K. Kim, S. Korenblit, R. Islam, E. E. Edwards, M.-S. Chang, C. Noh, H. Carmichael, G.-D. Lin, L.-M. Duan, C. C. Joseph Wang, J. K. Freericks und C. Monroe
Quantum simulation of the transverse Ising model with trapped ions
New J. Phys. **13** (2011) 105003
- [132] P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt und C. F. Roos
Quasiparticle engineering and entanglement propagation in a quantum many-body system
Nature **511**, 202 (2014)
- [133] R. Blatt und C. F. Roos
Quantum simulations with trapped ions
Nature Phys. **8**, 277 (2012)
- [134] B. P. Anderson und M. A. Kasevich
Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays
Science **282**, 1686 (1998)
- [135] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch und I. Bloch
Collapse and revival of the matter wave field of a Bose-Einstein condensate
Nature **419**, 39 (2002)
- [136] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin
Probing the Excitation Spectrum of a Fermi Gas in the BCS-BEC Crossover Regime
Phys. Rev. Lett. **94**, 070403 (2005)
- [137] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, and T. Esslinger
Fermionic Atoms in a Three Dimensional Optical Lattice: Observing Fermi Surfaces, Dynamics, and Interactions
Phys. Rev. Lett. **94**, 080403 (2005)
- [138] M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, C. A. Stan, S. M. F. Raupach und W. Ketterle
Formation Dynamics of a Fermion Pair Condensate
Phys. Rev. Lett. **94**, 180401 (2005)
- [139] J. K. Chin, D. E. Miller, Y. Liu, C. Stan, W. Setiawan, C. Sanner, K. Xu und W. Ketterle
Evidence for superfluidity of ultracold fermions in an optical lattice
Nature **443**, 26 (2006)
- [140] N. Strohmaier, D. Greif, R. Jördens, L. Tarruell, H. Moritz, T. Esslinger, R. Sensarma, D. Pekker, E. Altman und E. Demler
Observation of Elastic Doubloon Decay in the Fermi-Hubbard Model
Phys. Rev. Lett. **104**, 080401 (2010)
- [141] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres, P. Schausz, T. Fukuhara, C. Gross, I. Bloch, C. Kollath und S. Kuhr
Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system
Nature **481**, 484 (2012)
- [142] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss und M. Greiner
Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system
Science **353**, 794 (2016)
- [143] B. Sciolla und G. Biroli
Dynamical transitions and quantum quenches in mean-field models
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2011) P11003
- [144] A. Chandran, A. Nanduri, S. S. Gubser und S. L. Sondhi
Equilibration and coarsening in the quantum $O(N)$ model at infinite N
Phys. Rev. B **88**, 024306 (2013)

-
- [145] B. Sciolla und G. Biroli
Quantum quenches, dynamical transitions, and off-equilibrium quantum criticality
Phys. Rev. B **88**, 201110(R) (2013)
- [146] P. Smacchia, M. Knap, E. Demler und A. Silva
Exploring dynamical phase transitions and prethermalization with quantum noise of excitations
Phys. Rev. B **91**, 205136 (2015)
- [147] D. A. Smith, M. Gring, T. Langen, M. Kuhnert, B. Rauer, R. Geiger, T. Kitagawa, I. Mazets, E. Demler und J. Schmiedmayer
Prethermalization revealed by the relaxation dynamics of full distribution functions
New J. Phys. **15** (2013) 075011
- [148] J. Berges, Sz. Borsányi und C. Wetterich
Prethermalization
Phys. Rev. Lett. **93**, 142002 (2004)
- [149] T. Langen, T. Gasenzer und J. Schmiedmayer
Prethermalization and universal dynamics in near-integrable quantum systems
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2016) P064009
- [150] E. H. Lieb und D. W. Robinson
The finite group velocity of quantum spin systems
Commun. Math. Phys. **28**, 251 (1972)
- [151] B. Nachtergaele, Y. Ogata und R. Sims
Propagation of Correlations in Quantum Lattice Systems
J. Stat. Phys. **124**, 1 (2006)
- [152] J. Larson
Integrability versus quantum thermalization
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **46** (2013)
- [153] T. Kinoshita, T. Wenger and D. S. Weiss
A quantum Newton's cradle
Nature **440**, 900 (2006)
- [154] M. Srednicki
Chaos and quantum thermalization
Phys. Rev. E **50**, 888 (1994)
- [155] J. M. Deutsch
Quantum statistical mechanics in a closed system
Phys. Rev. A **43**, 2046 (1991)
- [156] M. Rigol und M. Srednicki
Alternatives to Eigenstate Thermalization
Phys. Rev. Lett. **108**, 110601 (2012)
- [157] L. F. Santos und M. Rigol
Onset of quantum chaos in one-dimensional bosonic and fermionic systems and its relation to thermalization
Phys. Rev. E **81**, 036206 (2010)
- [158] L. F. Santos und M. Rigol
Localization and the effects of symmetries in the thermalization properties of one-dimensional quantum systems
Phys. Rev. E **82**, 031130 (2010)
- [159] C. Neuenhahn and F. Marquardt
Thermalization of interacting fermions and delocalization in Fock space
Phys. Rev. E **85**, 060101(R) (2012)

- [160] K. R. Fratus und M. Srednicki
Eigenstate thermalization in systems with spontaneously broken symmetry
Phys. Rev. E **92**, 040103 (2015)
- [161] J. Sirker, N. P. Konstantinidis, F. Andraschko und N. Sedlmayr
Locality and thermalization in closed quantum systems
Phys. Rev. A **89**, 042104 (2014)
- [162] L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov und M. Rigol
From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics
Adv. Phys. **65**, 239 (2016)
- [163] H. Kim, T. N. Ikeda und D. A. Huse
Testing whether all eigenstates obey the eigenstate thermalization hypothesis
Phys. Rev. E **90**, 052105 (2014)
- [164] R. Hamazaki, T. N. Ikeda und M. Ueda
Generalized Gibbs ensemble in a nonintegrable system with an extensive number of local symmetries
Phys. Rev. E **93**, 032116 (2016)
- [165] G. Biroli, C. Kollath und A. M. Läuchli
Effect of Rare Fluctuations on the Thermalization of Isolated Quantum Systems
Phys. Rev. Lett. **105**, 250401 (2010)
- [166] T. N. Ikeda, Y. Watanabe und M. Ueda
Finite-size scaling analysis of the eigenstate thermalization hypothesis in a one-dimensional interacting Bose gas
Phys. Rev. E **87**, 012125 (2013)
- [167] R. Steinigeweg, J. Herbrych und P. Prelovšek
Eigenstate thermalization within isolated spin-chain systems
Phys. Rev. E **87**, 012118 (2013)
- [168] W. Beugeling, R. Moessner und M. Haque
Finite-size scaling of eigenstate thermalization
Phys. Rev. E **89**, 042112 (2014)
- [169] R. Steinigeweg, A. Khodja, H. Niemeyer, C. Gogolin und J. Gemmer
Pushing the Limits of the Eigenstate Thermalization Hypothesis towards Mesoscopic Quantum Systems
Phys. Rev. Lett. **112**, 130403 (2014)
- [170] A. Khodja, R. Steinigeweg und J. Gemmer
Relevance of the eigenstate thermalization hypothesis for thermal relaxation
Phys. Rev. E **91**, 012120 (2015)
- [171] R. Mondaini, K. R. Fratus, M. Srednicki und M. Rigol
Eigenstate thermalization in the two-dimensional transverse field Ising model
Phys. Rev. E **93**, 032104 (2016)
- [172] T. D. Kühner, S. R. White und H. Monien
One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction
Phys. Rev. B **61**, 12474 (2000)
- [173] N. Elstner und H. Monien
Dynamics and thermodynamics of the Bose-Hubbard model
Phys. Rev. B **59**, 12184 (1999)
- [174] R. Jastrow
Many-Body Problem with Strong Forces
Phys. Rev. **98**, 1479 (1955)

-
- [175] C. Gogolin, M. P. Müller und J. Eisert
Absence of Thermalization in Nonintegrable Systems
Phys. Rev. Lett. **106**, 040401 (2011)
- [176] J. Eisert, M. Friesdorf und C. Gogolin
Quantum many-body systems out of equilibrium
Nature Phys. **11**, 124 (2015)
- [177] C. Gogolin und J. Eisert
Equilibration, thermalisation and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems
Rep. Prog. Phys. **79** (2016) 056001
- [178] N. P. Konstantinidis
Thermalization away from integrability and the role of operator off-diagonal elements
Phys. Rev. E **91**, 052111 (2015)
- [179] N. P. Konstantinidis
Thermalization of a dimerized antiferromagnetic spin chain
J. Phys.: Condens. Mat. **28** (2016) 026001
- [180] J.-S. Caux und R. M. Konik
Constructing the Generalized Gibbs Ensemble after a Quantum Quench
Phys. Rev. Lett. **109**, 175301 (2012)
- [181] L. Vidmar und M. Rigol
Generalized Gibbs ensemble in integrable lattice models
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2016) P064007
- [182] F. H. L. Essler, G. Mussardo und M. Panfil
Generalized Gibbs ensembles for quantum field theories
Phys. Rev. A **91**, 051602(R) (2015)
- [183] E. Ilievski, J. De Nardis, B. Wouters, J.-S. Caux, F. H. L. Essler und T. Prosen
Complete Generalized Gibbs Ensembles in an Interacting Theory
Phys. Rev. Lett. **115**, 157201 (2015)
- [184] E. Ilievski, M. Medenjak, T. Prosen und L. Zadnik
Quasilocal charges in integrable lattice systems
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2016) P064008
- [185] B. Doyon
Thermalization and Pseudolocality in Extended Quantum Systems
Commun. Math. Phys. **351**, 155 (2017)
- [186] V. Alba und P. Calabrese
The quench action approach in finite integrable spin chains
J. Stat. Mech. (2016) 043105
- [187] J.-S. Caux
The Quench Action
J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2016) P064006
- [188] L. Campos Venuti und P. Zanardi
Unitary equilibrations: Probability distribution of the Loschmidt echo
Phys. Rev. A **81**, 022113 (2010)
- [189] P. Reimann
Foundation of Statistical Mechanics under Experimentally Realistic Conditions
Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008)
-

- [190] E. Ising
Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus
E. Z. Physik (1925) **31**: 253
- [191] E. H. Lieb, T. D. Schultz und D. C. Mattis
Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain
Ann. Phys. **16**, 407 (1961)
- [192] P. Pfeuty
The One-Dimensional Ising Model with a Transverse Field
Ann. Phys. **57**, 79 (1970)
- [193] R. J. Elliott, P. Pfeuty und C. Wood
Ising Model with a Transverse Field
Phys. Rev. Lett. **25**, 443 (1970)
- [194] P. Pfeuty und R. J. Elliott
The Ising model with a transverse field. II. Ground state properties
J. Phys. C: Solid St. Phys. **4**, 2370 (1971)
- [195] R. J. Elliott und C. Wood
The Ising model with a transverse field. I. High temperature expansion
J. Phys. C: Solid St. Phys. **4**, 2359 (1971)
- [196] B. M. McCoy
Spin Correlation Functions of the $X - Y$ Model
Phys. Rev. **173**, 531 (1968)
- [197] L. Onsager
Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition
Phys. Rev. **65**, 117 (1944)
- [198] C. N. Yang
The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model
Phys. Rev. **85**, 808 (1952)
- [199] E. W. Montroll, R. B. Potts und J. C. Ward
Correlations and Spontaneous Magnetization of the Two-Dimensional Ising Model
J. Math. Phys. **4**, 308 (1963)
- [200] T. D. Schultz, D. C. Mattis und E. H. Lieb
Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions
Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964)
- [201] T. T. Wu
Theory of Toeplitz Determinants and the Spin Correlations of the Two-Dimensional Ising Model. I
Phys. Rev. **149**, 380 (1966)
- [202] B. M. McCoy und T. T. Wu
Theory of Toeplitz Determinants and the Spin Correlations of the Two-Dimensional Ising Model.
II
Phys. Rev. **155**, 438 (1967)
- [203] H. Cheng und T. T. Wu
Theory of Toeplitz Determinants and the Spin Correlations of the Two-Dimensional Ising Model.
III
Phys. Rev. **164**, 719 (1967)
- [204] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico und A. Kitaev
Entanglement in Quantum Critical Phenomena
Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003)

-
- [205] J. I. Latorre, E. Rico and G. Vidal
Ground state entanglement in quantum spin chains
Quantum Inf. Comput. **4**, 048 (2004)
- [206] W. Pauli
Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons
E. Z. Physik (1927) **43**: 601
- [207] M. B. Hastings
Locality in Quantum and Markov Dynamics on Lattices and Networks
Phys. Rev. Lett. **93**, 140402 (2004)
- [208] M. S. L. du Croo de Jongh und J. M. J. van Leeuwen
Critical behavior of the two-dimensional Ising model in a transverse field: A density-matrix renormalization calculation
Phys. Rev. B **57**, 8494 (1998)
- [209] H. Rieger und N. Kawashima
Application of a continuous time cluster algorithm to the two-dimensional random quantum Ising ferromagnet
Eur. Phys. J. B **9**, 233 (1999)
- [210] B. Liu und M. Gitterman
The critical temperature of two-dimensional and three-dimensional Ising models
Am. J. Phys. **71**, 806 (2003)
- [211] M. Gitterman und V. H. Halpern
Phase Transitions - A Brief Account with Modern Applications
World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2004)
ISBN 978-981-238-903-9
- [212] B. Nachtergaele und R. Sims
Lieb-Robinson bounds and the exponential clustering theorem
Commun. Math. Phys. **265**, 119 (2006)
- [213] M. Kliesch, C. Gogolin, M. J. Kastoryano, A. Riera und J. Eisert
Locality of Temperature
Phys. Rev. X **4**, 031019 (2014)
- [214] T. Prosen
A new class of completely integrable quantum spin chains
J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 397 (1998)
- [215] M. Grady
Infinite set of conserved charges in the Ising model
Phys. Rev. D **25**, 1103 (1981)
- [216] B. Blaß
Quantenrelaxation in der Spin-1/2-XY-Kette mit freien Randbedingungen
Diplomarbeit, Universität des Saarlandes, Theoretische Physik, AG Prof. Dr. Heiko Rieger (2011)
- [217] F. Iglói und L. Turban
Common Trends in the Critical Behaviour of the Ising and Directed Walk Models
Phys. Rev. Lett. **77**, 1206-1209 (1996)
- [218] P. Jordan und E. P. Wigner
Über das Paulische Äquivalenzverbot
Z. Phys. **47**, 631 (1928)
-

- [219] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery
Numerical Recipes in C++ - The Art of Scientific Computing, Second Edition
Cambridge University Press (2002)
ISBN 978-0-521-75033-4
- [220] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu und B. Schumacher
Concentrating partial entanglement by local operations
Phys. Rev. A **53**, 2046 (1996)
- [221] G. C. Wick
The Evaluation Of The Collision Matrix
Phys. Rev. **80**, 268 (1950)
- [222] S. Sachdev und A. P. Young
Low Temperature Relaxational Dynamics of the Ising Chain in a Transverse Field
Phys. Rev. Lett. **78**, 2220 (1997)
- [223] L. Pucci, A. Roy und M. Kastner
Simulation of quantum spin dynamics by phase space sampling of Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon trajectories
Phys. Rev. B **93**, 174302 (2016)
- [224] G. Carleo
Spectral And Dynamical Properties Of Strongly Correlated Systems
- Methods And Applications
PhD Thesis, International School for Advanced Studies
- [225] J. A. Hafner
Theoretische Untersuchungen zur Quantenrelaxation des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells
Masterarbeit, Universität des Saarlandes, Theoretische Physik, AG Prof. Dr. Heiko Rieger (2016)
- [226] E. Fradkin
Jordan-Wigner transformation for quantum-spin systems in two dimensions and fractional statistics
Phys. Rev. Lett. **63**, 322 (1989)
- [227] Y. R. Wang
Ground state of the two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model studied using an extended Wigner-Jordan transformation
Phys. Rev. B **43**, 3786(R) (1991)
- [228] Y. R. Wang
In-phase flux state of the two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model and the Raman spectrum of La_2CuO_4
Phys. Rev. B **43**, 13774(R) (1991)
- [229] Y. R. Wang
Spin-liquid state of Wigner-Jordan fermions of the quantum antiferromagnetic Heisenberg model on a triangular lattice
Phys. Rev. B **45**, 12604 (1992)
- [230] Y. R. Wang
Low-dimensional quantum antiferromagnetic Heisenberg model studied using Wigner-Jordan transformations
Phys. Rev. **46**, 151 (1992)
- [231] M. Azzouz
Interchain-coupling effect on the one-dimensional spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model
Phys. Rev. B **48**, 6136 (1993)

-
- [232] M. Azzouz, L. Chen und S. Moukouri
Calculation of the singlet-triplet gap of the antiferromagnetic Heisenberg model on a ladder
Phys. Rev. B **50**, 6233 (1994)
- [233] M. Azzouz und C. Bourbonnais
Mean-field theory of the spin-Peierls state under magnetic field: Application to $CuGeO_3$
Phys. Rev. B **53**, 5090 (1996)
- [234] M. Azzouz, B. Dumoulin und A. Benyoussef
Incommensurate nodes in the energy spectrum of coupled antiferromagnetic Heisenberg ladders
Phys. Rev. B **55**, R11957(R) (1997)
- [235] O. Derzhko
Jordan-Wigner fermionization for spin- $\frac{1}{2}$ systems in two dimensions: A brief review
J. Phys. Stud. **5**, 1, 49 (2001)
- [236] O. Derzhko, J. Richter und T. Verkholyaka
2D quantum spin models and Jordan-Wigner fermions
Czech. J. Phys. **52**, A41 (2002)
- [237] O. Derzhko, T. Verkholyaka, R. Schmidt und J. Richter
Square-lattice $s = \frac{1}{2}$ XY model and the Jordan-Wigner fermions: the ground-state and thermodynamic properties
Physica A **320** (2003) 407
- [238] O. Derzhko und T. Krokhmalkii
Jordan-Wigner approach to dynamic correlations in 2D spin- $\frac{1}{2}$ models
Czech. J. Phys. **55**, 601 (2005)
- [239] M. Le Bellac, F. Mortessagne und G. G. Batrouni
Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics
Cambridge University Press (2004)
ISBN 978-0-521-82143-8
- [240] M. Suzuki
Relationship between d -Dimensional Quantal Spin Systems and $(d + 1)$ -Dimensional Ising Systems
Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976)
- [241] R. H. Swendsen und J.-S. Wang
Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations
Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987)
- [242] K. Binder
Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions
Z. Phys. B **43**, 119 (1981)
- [243] K. Ido, T. Ohgoe und M. Imada
Time-dependent many-variable variational Monte Carlo method for nonequilibrium strongly correlated electron systems
Phys. Rev. B **92**, 245106 (2015)
- [244] R. F. Bishop, D. J. J. Farnell und M. L. Ristig
Ab Initio Treatments of the Ising Model in a Transverse Field
Int. J. Mod. Phys. B **14**, 1517 (2000)
- [245] S. Sorella
Wave function optimization in the variational Monte Carlo method
Phys. Rev. B **71**, 241103(R) (2005)
- [246] A. K. Hartmann
Sampling rare events: Statistics of local sequence alignments
Phys. Rev. E **65**, 056102 (2002)

- [247] M. Fagotti und F. H. L. Essler
Reduced density matrix after a quantum quench
Phys. Rev. B **87**, 245107 (2013)
- [248] A. Vardi und J. R. Anglin
Bose-Einstein Condensates beyond Mean Field Theory: Quantum Backreaction as Decoherence
Phys. Rev. Lett. **86**, 568 (2001)
- [249] L. D. Filatova und V. M. Tsukernik
A Quantum Spin Wave Theory for an Ising Ferromagnet in a Transverse Magnetic Field
phys. stat. sol. (b) **70**, 47 (1975)
- [250] M. Saito und M. Matsumoto
<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/SFMT/index.html>
- [251] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth und A. H. Teller
Equation of State Calculations by Fast Computing Machines
J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)

Anhang

A Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs

Den Ausgangspunkt der Herleitung der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter und der Phase bildet der euklidische Abstand der exakten Zeitentwicklung der Wellenfunktion gemäß der Schrödinger-Gleichung und der Variationszeitentwicklung aus (4.99)

$$\mathcal{D}(t) = \sqrt{\sum_{\xi} \left(|\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left| \dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) + \imath E_{\text{lokal}}(\xi, t) \right|^2 \right)}. \quad (\text{A.1})$$

Zur Vereinfachung der Notation wird die komplexwertige Größe

$$Z(\xi, t) := \dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \mathcal{O}_k(\xi) + \imath E_{\text{lokal}}(\xi, t) \quad (\text{A.2})$$

eingeführt. Diese erlaubt es, $\mathcal{D}(t)$ umzuschreiben zu

$$\mathcal{D}(t) = \sqrt{\sum_{\xi} \left(|\Psi(\xi, t)|^2 \cdot |Z(\xi, t)|^2 \right)} = \sqrt{\sum_{\xi} \left(|\Psi(\xi, t)|^2 \cdot (Z_R^2(\xi, t) + Z_I^2(\xi, t)) \right)}. \quad (\text{A.3})$$

$Z_R(\xi, t)$ und $Z_I(\xi, t)$ sind der Real- bzw. Imaginärteil von $Z(\xi, t)$ mit

$$Z_R(\xi, t) = \dot{\phi}_R(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k^R(t) \mathcal{O}_k(\xi) - E_{\text{lokal}}^I(\xi, t), \quad (\text{A.4a})$$

$$Z_I(\xi, t) = \dot{\phi}_I(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k^I(t) \mathcal{O}_k(\xi) + E_{\text{lokal}}^R(\xi, t). \quad (\text{A.4b})$$

Zur Bestimmung des Minimums von $\mathcal{D}(t)$ wird der Gradient gebildet und seine Komponenten gleich null gesetzt. Es ist

$$\frac{\partial \mathcal{D}(t)}{\partial \dot{\alpha}_{k'}^R(t)} = \frac{1}{\mathcal{D}(t)} \sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot Z_R(\xi, t) \cdot \mathcal{O}_{k'}(\xi) \stackrel{!}{=} 0, \quad (\text{A.5a})$$

$$\frac{\partial \mathcal{D}(t)}{\partial \dot{\alpha}_{k'}^I(t)} = \frac{1}{\mathcal{D}(t)} \sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot Z_I(\xi, t) \cdot \mathcal{O}_{k'}(\xi) \stackrel{!}{=} 0, \quad (\text{A.5b})$$

$$\frac{\partial \mathcal{D}(t)}{\partial \dot{\phi}_R(t)} = \frac{1}{\mathcal{D}(t)} \sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot Z_R(\xi, t) \stackrel{!}{=} 0, \quad (\text{A.5c})$$

$$\frac{\partial \mathcal{D}(t)}{\partial \dot{\phi}_I(t)} = \frac{1}{\mathcal{D}(t)} \sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot Z_I(\xi, t) \stackrel{!}{=} 0. \quad (\text{A.5d})$$

Einsetzen der Ausdrücke (A.4a) und (A.4b) für $Z_R(\xi, t)$ bzw. $Z_I(\xi, t)$ liefert

$$\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left(\dot{\phi}_R(t) \mathcal{O}_{k'}(\xi) + \sum_k \dot{\alpha}_k^R(t) \mathcal{O}_k(\xi) \mathcal{O}_{k'}(\xi) - E_{\text{lokal}}^I(\xi, t) \mathcal{O}_{k'}(\xi) \right) = 0, \quad (\text{A.6a})$$

$$\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left(\dot{\phi}_I(t) \mathcal{O}_{k'}(\xi) + \sum_k \dot{\alpha}_k^I(t) \mathcal{O}_k(\xi) \mathcal{O}_{k'}(\xi) + E_{\text{lokal}}^R(\xi, t) \mathcal{O}_{k'}(\xi) \right) = 0, \quad (\text{A.6b})$$

$$\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left(\dot{\phi}_R(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k^R(t) \mathcal{O}_k(\xi) - E_{\text{lokal}}^I(\xi, t) \right) = 0, \quad (\text{A.6c})$$

$$\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \cdot \left(\dot{\phi}_I(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k^I(t) \mathcal{O}_k(\xi) + E_{\text{lokal}}^R(\xi, t) \right) = 0. \quad (\text{A.6d})$$

Durch Zusammenfassen von (A.6a) und (A.6b) sowie von (A.6c) und (A.6d) ergibt sich

$$\dot{\phi}(t) \langle \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \langle \hat{\mathcal{O}}_k \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle + \imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle = 0 , \quad (\text{A.7a})$$

$$\dot{\phi}(t) + \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \langle \hat{\mathcal{O}}_k \rangle + \imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \rangle = 0 . \quad (\text{A.7b})$$

Dabei ist der Erwartungswert $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$ für einen allgemeinen Operator $\hat{\mathcal{O}}$ gegeben durch

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle := \frac{\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2 \mathcal{O}(\xi)}{\sum_{\xi} |\Psi(\xi, t)|^2} . \quad (\text{A.8})$$

Auflösen von (A.7b) nach $\dot{\phi}(t)$ und Einsetzen in (A.7a) ergibt schließlich die im Begleitmaterial von [98] angegebenen Bewegungsgleichungen der Variationsparameter und der Phase

$$\sum_k \dot{\alpha}_k(t) \langle \delta \hat{\mathcal{O}}_k \delta \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle = -\imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \delta \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle , \quad (\text{A.9a})$$

$$\dot{\phi}(t) = -\imath \langle E_{\text{lokal}}(t) \rangle - \sum_k \dot{\alpha}_k(t) \langle \hat{\mathcal{O}}_k \rangle . \quad (\text{A.9b})$$

Dabei ist $\delta \hat{\mathcal{O}}$ für einen allgemeinen Operator $\hat{\mathcal{O}}$ definiert als

$$\delta \hat{\mathcal{O}} := \hat{\mathcal{O}} - \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle . \quad (\text{A.10})$$

B Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs

Die Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Wechselwirkungsquenchs lauten unter Verwendung des Jastrowansatzes (4.103)

$$\sum_{\mathbf{r}'} \langle \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \delta \hat{C}_{\mathbf{r}'}^{xx} \rangle \dot{\alpha}_{\mathbf{r}'}(t) = -i \langle E_{\text{lokal}}(t) \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \rangle . \quad (\text{B.1})$$

Bei den Koeffizienten der Bewegungsgleichungen handelt es sich um zeitabhängige Erwartungswerte der Gestalt

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{x}} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathcal{O}(\mathbf{x})}{\sum_{\mathbf{x}} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2} . \quad (\text{B.2})$$

Ihre Bestimmung erfolgt in der \mathbf{x} -Basis mithilfe eines Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus [244]. Der Algorithmus approximiert die quantenmechanischen Erwartungswerte durch Mittelwerte über Konfigurationen des Systems, die gemäß der durch den Zustand des Systems zum Zeitpunkt t bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung erzeugt werden. Der Fehler ist umgekehrt proportional zur Wurzel der Anzahl der Stichproben, über die der Mittelwert gebildet wird.

Die Erzeugung der Stichproben durch den Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus erfolgt als Markow-Kette. Den Ausgangspunkt bildet ein zufällig gewählter Basiszustand. Die Konfiguration wird mit \mathbf{x}_0 bezeichnet und dadurch bestimmt, dass jedem Spin des Systems mit gleicher Wahrscheinlichkeit die Orientierung up oder down zugeordnet wird. In jedem Schritt des Algorithmus wird der Umklapp eines zufällig gewählten Spins des Systems vorgeschlagen. Der Algorithmus wird aus diesem Grund als Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus bezeichnet. Sei \mathbf{x} die aktuelle Konfiguration des Systems und \mathbf{x}' die vorgeschlagene Konfiguration. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit für den Monte-Carlo-Schritt $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$ ist dann gegeben durch

$$A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \min [1, Q(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t)] . \quad (\text{B.3})$$

Dabei ist

$$Q(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \frac{P(\mathbf{x}', t) T(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})}{P(\mathbf{x}, t) T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')} . \quad (\text{B.4})$$

$P(\mathbf{x}, t)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Basiszustände der \mathbf{x} -Basis zum Zeitpunkt t . Sie wird durch den Zustand $|\Psi(t)\rangle$ des Systems zum Zeitpunkt t bestimmt gemäß

$$P(\mathbf{x}, t) = \frac{|\langle \mathbf{x} | \Psi(t) \rangle|^2}{\sum_{\mathbf{x}'} |\langle \mathbf{x}' | \Psi(t) \rangle|^2} = \frac{|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2}{\sum_{\mathbf{x}'} |\Psi(\mathbf{x}', t)|^2} . \quad (\text{B.5})$$

Da die Operatoren $\hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx}$ diagonal in der \mathbf{x} -Basis sind, kann das Skalarprodukt $\Psi(\mathbf{x}, t)$ einfach berechnet werden. Es ist

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \exp \left(\sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}(t) C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}) \right) \quad (\text{B.6})$$

mit

$$C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} | \mathbf{x} \rangle . \quad (\text{B.7})$$

$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ ist die Verteilungsfunktion. Im Falle des transversalen Ising-Modells ist sie zeitunabhängig und umgekehrt proportional zu der Anzahl $K(\mathbf{x})$ an Basiszuständen, die ausgehend von der gegenwärtigen Konfiguration \mathbf{x} durch Wirkung des Nichtdiagonalanteils des Hamiltonoperators erreicht werden können. $K(\mathbf{x})$ entspricht somit für jede Konfiguration \mathbf{x} gerade der Anzahl der Spins des Systems, sodass

$$T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{1}{N} . \quad (\text{B.8})$$

Einsetzen der Ausdrücke für $P(\mathbf{x}, t)$ und $T(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ in (B.4) ergibt

$$Q(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \exp \left\{ 2 \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}^R(t) (C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}') - C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})) \right\}. \quad (\text{B.9})$$

$\alpha_{\mathbf{r}}^R(t)$ bezeichnet hierbei den Realteil von $\alpha_{\mathbf{r}}(t)$. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit für den vorgeschlagenen Monte-Carlo-Schritt von der Konfiguration \mathbf{x} zur Konfiguration \mathbf{x}' lautet somit

$$A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \min \left[1, \exp \left\{ 2 \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}^R(t) (C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}') - C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})) \right\} \right]. \quad (\text{B.10})$$

$A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ hängt nicht explizit vom Hamiltonoperator des Systems ab, sondern die Parameter des Hamiltonoperators finden dadurch Einzug, dass sie die Zeitentwicklung der Variationsparameter bestimmen, welche wiederum die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Basiszustände der \mathbf{x} -Basis im Zustand des Systems zum Zeitpunkt t angeben.

Bei der Approximation der Erwartungswerte durch Monte-Carlo-Mittelwerte ist es wichtig, dass die Konfigurationen des Systems, über die der Mittelwert gebildet wird, unabhängig voneinander sind. Dies ist für den beschriebenen Single-Spin-Monte-Carlo-Algorithmus für aufeinanderfolgende Konfigurationen offensichtlich nicht der Fall. Bei der Bildung des Mittelwertes muss somit zwischen zwei Konfigurationen, für die eine Messung durchgeführt wird, d. h. die zur Bildung des Mittelwertes verwendet werden, eine gewisse Anzahl an Konfigurationen verworfen werden. Weiterhin ist zu beachten, dass es sich bei der Anfangskonfiguration \mathbf{x}_0 aufgrund ihrer zufälligen Erzeugung um eine sehr unwahrscheinliche Konfiguration des Systems handeln kann. Aus diesem Grund werden die zu Beginn des Monte-Carlo-Verfahrens erzeugten Konfigurationen ebenfalls nicht bei der Bestimmung der Mittelwerte berücksichtigt. Dem System wird somit Zeit zum Equilibrieren gegeben. Auf die genaue Anzahl der zu Beginn und zwischen zwei Messungen verworfenen Konfigurationen wird im Haupttext eingegangen. Im Folgenden wird die effiziente Implementierung des Algorithmus erläutert. Die Anfangskonfiguration des Systems wird zufällig erzeugt, indem für jede der N Positionen des Systems eine Zufallszahl erzeugt und jedem Spin auf dieser Grundlage die Orientierung up oder down zugewiesen wird. Zur Erzeugung der Zufallszahlen wird der von Saito und Matsumoto entwickelte SIMD-orientierte Fast Mersenne-Twister (SFMT) verwendet [250]. Die erzeugten Zufallszahlen liegen gleichverteilt auf dem Intervall $(0, 1)$. Ist die erzeugte Zufallszahl kleiner als 0.5, so wird dem Spin die Orientierung down zugewiesen, andernfalls die Orientierung up. Die Konfiguration des Systems wird in Form eines Arrays aus Bool-Variablen gespeichert (up=true, down=false). Für die Anfangskonfiguration muss für alle möglichen Spinpaare des Systems die relative Orientierung bestimmt werden. Jedes Spinpaar wird der zugehörigen unabhängigen Richtung \mathbf{r} auf dem Gitter zugeordnet, sodass alle Korrelationsfunktionen $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}_0)$ bestimmt werden. Sie werden in einer Liste abgelegt. In jedem Monte-Carlo-Schritt wird nun der Umklapp der Orientierung eines zufällig gewählten Spins des Systems vorgeschlagen. Zur Bestimmung des Position wird eine Zufallszahl erzeugt und mit der Systemgröße N multipliziert. Umwandlung der sich ergebenden Gleitkommazahl in die nächstkleinere natürliche Zahl ergibt die Position des Spins, dessen Umklapp vorgeschlagen wird. Hierbei ist zu beachten, dass die Positionen des Gitters mit 0 bis $N - 1$ durchnummeriert sind. Die Korrelationen $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})$ sowie die aktuelle Konfiguration \mathbf{x} des Systems sind gespeichert. Der Spinumklapp entspricht einem Übergang von der Konfiguration \mathbf{x} zur Konfiguration \mathbf{x}' , die sich von \mathbf{x} nur durch die Orientierung eines einzelnen Spins unterscheidet. Wie (B.10) zu entnehmen ist, ist zur Bestimmung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Überganges die Differenz der Korrelationen zwischen der vorgeschlagenen und der aktuellen Konfiguration für alle \mathbf{r} erforderlich. Diese Differenz kann effizient bestimmt werden, indem die relative Orientierung aller Spinpaare bestimmt wird, die den Spin enthalten, dessen Umklapp durch den Monte-Carlo-Schritt vorgeschlagen wurde. Alle anderen Spinpaare, die diese Position nicht enthalten, sind für die Differenz der Korrelationen unerheblich. Es werde etwa der Umklapp des Spins an der Position \mathbf{R} vorgeschlagen. $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}, \mathbf{R})$ bezeichne den Beitrag der Spinpaare, die den Spin an der Position \mathbf{R} enthalten, zur Korrelationsfunktion $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})$ zweier Spins im Abstand \mathbf{r} in der aktuellen Konfiguration \mathbf{x} des Systems. Dann ist $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}', \mathbf{R}) = -C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}, \mathbf{R})$, sodass die Differenz $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}') - C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})$ im Argument der Exponentialfunktion in $Q(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t)$ den Wert $-2C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}, \mathbf{R})$ annimmt und die Akzeptanzwahrscheinlichkeit für den Umklapp des Spins an der Position \mathbf{R} somit geschrieben werden kann als

$$A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t) = \min \left[1, \exp \left\{ -4 \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}}^R(t) C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}, \mathbf{R}) \right\} \right]. \quad (\text{B.11})$$

Nachdem die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des vorgeschlagenen Monte-Carlo-Schritts bekannt ist, wird wiederum durch Erzeugung einer Zufallszahl bestimmt, ob der Spinumklapp akzeptiert wird. Dies ist der Fall, wenn die erzeugte Zufallszahl kleiner als $A(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}', t)$ ist. Die gespeicherte Konfiguration \mathbf{x} wird dann durch die neue Konfiguration \mathbf{x}' ersetzt sowie die Korrelationen $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})$ durch $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x}')$. Andernfalls verbleibt das System in der Konfiguration \mathbf{x} und die gespeicherte Konfiguration sowie die Korrelationen müssen nicht aktualisiert werden.

Durch das beschriebene Verfahren sind die Korrelationen $C_{\mathbf{r}}^{xx}(\mathbf{x})$ nach jedem Monte-Carlo-Schritt bekannt. Sie können unmittelbar zur Bestimmung der Monte-Carlo-Mittelwerte für die Observablen verwendet werden. Da der Betrag der Magnetisierung nicht in der Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus auftritt, wird er nur nach den Monte-Carlo-Schritten bestimmt, für die eine Messung ausgeführt wird. Das gleiche gilt für die Erwartungswerte, die die Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter darstellen.

C Anfangswerte der Variationsparameter im Jastrowansatz für $J_0 \neq 0$

Im Folgenden soll gezeigt werden, wie die Anfangswerte $\alpha_{\mathbf{r}}(t=0)$ der Variationsparameter des Jastrowansatzes für das zweidimensionale transversale Ising-Modell nach den Wechselwirkungsquenches bestimmt werden können, wenn $J_0 \neq 0$ ist. Zudem erlaubt dieses Verfahren die Bestimmung der Grundzustandsenergie und -magnetisierung des Systems für einen weiten Parameterbereich h/J . Hierzu wird ein von Sorella [245] entwickelter Algorithmus verwendet, der als Stochastische Rekonfigurationstechnik mit Hessescher Beschleunigung (Stochastic Reconfiguration Technique with Hessian Acceleration, SRH) bezeichnet wird und eine ähnliche Strategie wie die bekannte Newton-Methode (NM) verfolgt, jedoch für Variations-Monte-Carlo-Verfahren bedeutend effizienter ist. Die Betrachtungen erfolgen zunächst wieder allgemein für Variationsparameter α_k und Operatoren \hat{O}_k , die in der Basis $\{|\xi\rangle\}$ diagonal sind. Das SRH-Verfahren basiert auf der Minimierung des Erwartungswertes der Energie

$$E_{\alpha} = \frac{\langle \Psi_{\alpha} | \hat{H} | \Psi_{\alpha} \rangle}{\langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle} \equiv \langle \hat{H} \rangle \quad (\text{C.1})$$

des Variationszustandes

$$|\Psi_{\alpha}\rangle = \exp \left\{ \sum_k \alpha_k \delta \hat{O}_k \right\} |\Phi\rangle \quad (\text{C.2})$$

in Bezug auf den Hamiltonoperator \hat{H} und erlaubt die effiziente Optimierung des Variationszustandes auch für eine große Anzahl an Variationsparametern. Der Variationszustand $|\Psi_{\alpha}\rangle$ ist hierbei zeitunabhängig. Im Argument der Exponentialfunktion wurde \hat{O}_k durch $\delta \hat{O}_k = \hat{O}_k - \langle \hat{O}_k \rangle$ ersetzt. Hierdurch ergibt sich lediglich eine irrelevante multiplikative Konstante. In der Notation wird die Abhängigkeit der Variationswellenfunktion von den Variationsparametern im Gegensatz zu den Betrachtungen an den anderen Stellen der vorliegenden Dissertation explizit angegeben, da die Variationsparameter durch den Algorithmus optimiert werden.

Zur Minimierung der Energie wird der Einfluss einer kleinen Änderung der Variationsparameter von α zu $\alpha + \gamma$ betrachtet. In der Newton-Methode wird der Erwartungswert $E_{\alpha+\gamma}$ in quadratischer Ordnung in γ entwickelt und minimiert. Anschließend werden die Variationsparameter entsprechend abgeändert und der Vorgang wird iterativ wiederholt, bis ein Energieminimum gefunden wurde. Im Gegensatz hierzu verwendet das Verfahren von Sorella eine allgemeinere Form der Entwicklung von $|\Psi_{\alpha+\gamma}\rangle$ durch Einführung eines weiteren Parameters β :

$$|\Psi_{\alpha+\gamma}\rangle \simeq \left[1 + \sum_k \gamma_k \delta \hat{O}_k + \frac{\beta}{2} \sum_{k,k'} \gamma_k \gamma_{k'} \delta \hat{O}_k \delta \hat{O}_{k'} \right] |\Psi_{\alpha}\rangle . \quad (\text{C.3})$$

Durch geschickte Wahl des Parameters β kann die Effizienz der Minimierungsroutine des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens gesteigert werden. Dabei wird wohlgemerkt der Wert des Energieminimums nicht verändert, da bei Annäherung an dieses die nichtlinearen Beiträge proportional zu β sowie Beiträge höherer Ordnung gegenüber den linearen Beiträgen zunehmend an Bedeutung verlieren. Für $\beta = 1$ geht das Verfahren in die Newton-Methode über.

Wie in [245] gezeigt wurde, ergibt sich durch Einsetzen der Entwicklung (C.3) in den Ausdruck (C.1) für den Erwartungswert der Energie des Variationszustandes folgende Änderung der Energie

$$\Delta E := E_{\alpha+\gamma} - E_{\alpha} = - \sum_k \gamma_k f_k + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \gamma_k \gamma_{k'} [S_h + (1 + \beta)G]^{k,k'} \quad (\text{C.4})$$

mit

$$f_k := -\partial_{\alpha_k} E_{\alpha} = -2 \langle (\hat{H} - E_{\alpha}) \hat{O}_k \rangle , \quad (\text{C.5a})$$

$$S_h^{k,k'} := \langle [\hat{O}_k [\hat{H}, \hat{O}_{k'}]] \rangle , \quad (\text{C.5b})$$

$$G^{k,k'} := 2 \langle (\hat{H} - E_{\alpha}) \delta \hat{O}_k \delta \hat{O}_{k'} \rangle . \quad (\text{C.5c})$$

Nach [245] können die f_k als Kräfte interpretiert werden, die auf die Variationsparameter wirken. Sie verschwinden, wenn das Energieminimum erreicht ist. Bei der Matrix S_h handelt es sich um die Anregungsmatrix in Bezug auf die Operatoren $\hat{\mathcal{O}}_k$. Die Matrix G schließlich berücksichtigt die verbleibenden Beiträge, wenn die Wellenfunktion nicht exakt ist, d. h. wenn E_α nicht mit $\langle \hat{H} \rangle$ übereinstimmt. G sollte aus diesem Grund für eine gute Variationswellenfunktion klein im Vergleich zu S_h sein. Eine genaue Betrachtung von (C.4) zeigt, dass sich für den Fall, dass

$$B := S_h + (1 + \beta)G \quad (\text{C.6})$$

positiv definit ist, aus der Minimierung von ΔE eine Vorschrift für die Änderung der Variationsparameter $\alpha_k \rightarrow \alpha_k + \gamma_k$ in Richtung des Zustandes minimaler Energie herleiten lässt. Die zugehörigen Werte der γ_k ergeben sich gemäß [245] als Lösung der Gleichung

$$B\gamma = f. \quad (\text{C.7})$$

Ist die Matrix B hingegen nicht positiv definit, so ist Gleichung (C.4) nicht von unten beschränkt. Infolgedessen sind in der Entwicklung auch Terme höherer Ordnung zu berücksichtigen. Andernfalls besteht die Möglichkeit, dass die Änderung der Variationsparameter um γ gemäß der Lösung von Gleichung (C.7) zu einem Zustand höherer Energie führt. Um ein wohldefiniertes Minimum der Energiedifferenz ΔE zu erreichen, wird in dem Verfahren nach Sorella in diesem Fall statt der Matrix B die Matrix $B + \mu S$ betrachtet. Hierbei ist

$$S^{k,k'} := \langle \delta \hat{\mathcal{O}}_k \delta \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}}_k \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle - \langle \hat{\mathcal{O}}_k \rangle \langle \hat{\mathcal{O}}_{k'} \rangle \quad (\text{C.8})$$

die positiv definite Korrelationsmatrix und μ eine noch zu bestimmende Konstante. Die Existenz des wohldefinierten Minimums von ΔE wird erreicht durch die Forderung, dass die lineare Änderung der Variationswellenfunktion in γ

$$\Delta W F = \frac{|\Psi_{\alpha+\gamma}\rangle - |\Psi_\alpha\rangle}{|\Psi_\alpha\rangle} \quad (\text{C.9})$$

nach oben beschränkt ist. Der zugehörige Kontrollparameter r ist durch die Ungleichung

$$|\Delta W F|^2 = \sum_{k,k'} \gamma_k \gamma_{k'} S^{k,k'} \leq r^2 \quad (\text{C.10})$$

bestimmt. Die Verwendung von $B + \mu S$ ermöglicht es nun einerseits, immer mit einer positiv definiten Matrix zu arbeiten. Andererseits ist für hinreichend kleine r sichergestellt, dass die Energie durch eine Änderung der Variationsparameter gemäß Gleichung (C.7) abnimmt. Es verbleibt die Bestimmung der Konstante $\mu \geq 0$. μ ist immer dann ungleich 0, wenn B nicht positiv definit oder $|\Delta W F| > r$ ist. In diesen Fällen ist μ als Lagrangemultiplikator durch Minimierung von $\Delta E + \mu |\Delta W F|^2$ unter der Nebenbedingung $|\Delta W F| = r$ zu bestimmen. Dies kann mit bekannten Minimierungsroutinen erfolgen.

Die Erwartungswerte in den Ausdrücken für die Kräfte f_k (C.5a), die Anregungsmatrix S_h (C.5b), die Matrix G (C.5c) und die Korrelationsmatrix S (C.8) werden als statistische Mittelwerte bestimmt. In [245] wurde gezeigt, dass sie dann geschrieben werden können in der Form

$$f_k = -2 \langle \langle \delta E_{\text{lokal},\alpha}(\xi) \delta \mathcal{O}_k(\xi) \rangle \rangle, \quad (\text{C.11a})$$

$$S_h^{k,k'} = \langle \langle \delta \partial_{\alpha_k} E_{\text{lokal},\alpha}(\xi) \delta \mathcal{O}_{k'}(\xi) \rangle \rangle + \langle \langle \delta \partial_{\alpha_{k'}} E_{\text{lokal},\alpha}(\xi) \delta \mathcal{O}_k(\xi) \rangle \rangle, \quad (\text{C.11b})$$

$$G^{k,k'} = 2 \langle \langle \delta E_{\text{lokal},\alpha}(\xi) \delta \mathcal{O}_k(\xi) \delta \mathcal{O}_{k'}(\xi) \rangle \rangle, \quad (\text{C.11c})$$

$$S^{k,k'} = \langle \langle \delta \mathcal{O}_k(\xi) \delta \mathcal{O}_{k'}(\xi) \rangle \rangle, \quad (\text{C.11d})$$

wobei $\langle \langle \rangle \rangle$ die statistischen Mittelwerte bezeichnet. $E_{\text{lokal},\alpha}$ ist die lokale Energie gemäß (4.92). Für das transversale Ising-Modell werden die statistischen Mittelwerte mithilfe des in Anhang B beschriebenen Single-Spin-Flip-Monte-Carlo-Algorithmus bestimmt. Die Variationswellenfunktion lautet hierbei

$$|\Psi_\alpha\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}} \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \right\} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle_z. \quad (\text{C.12})$$

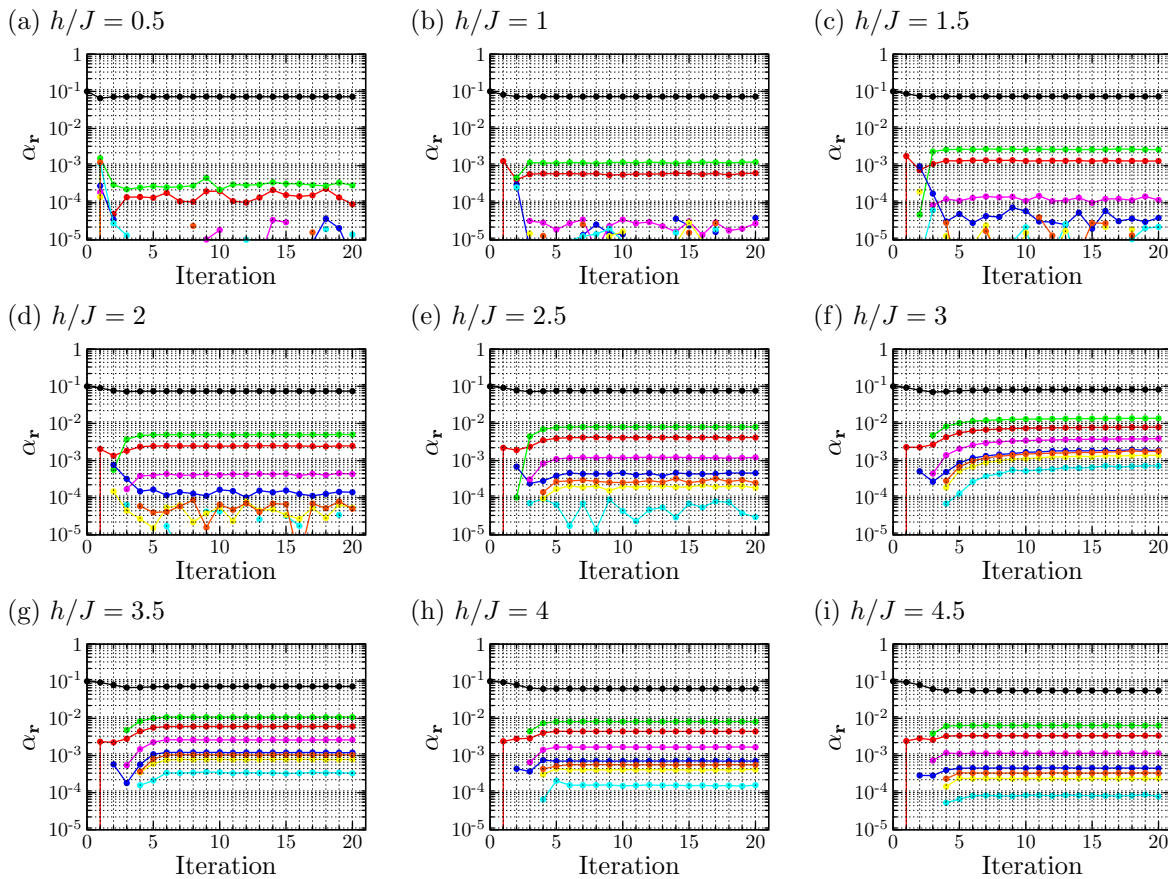


Abbildung C.1: (a)-(i) Konvergenz der Variationsparameter $\alpha_{\mathbf{r}}$, die zu Korrelationen gehören, bei denen der Abstand der beiden Spins in Manhattan-Metrik ≤ 4 ist, für verschiedene Verhältnisse h/J . Der Farbcode ist \bullet $\mathbf{r} = (1, 0)$, $\color{red}\bullet$ $\mathbf{r} = (2, 0)$, $\color{green}\bullet$ $\mathbf{r} = (1, 1)$, $\color{blue}\bullet$ $\mathbf{r} = (3, 0)$, $\color{magenta}\bullet$ $\mathbf{r} = (2, 1)$, $\color{cyan}\bullet$ $\mathbf{r} = (4, 0)$, $\color{yellow}\bullet$ $\mathbf{r} = (3, 1)$, $\color{orange}\bullet$ $\mathbf{r} = (2, 2)$. Die Variationsparameter zeigen eine schnelle Konvergenz unter dem verwendeten Verfahren. Für kleine Verhältnisse h/J sind die zu Korrelationen zwischen Spins in größerem Abstand zueinander gehörigen Variationsparameter von geringerer Bedeutung.

Weiterhin wird der zusätzliche Parameter β in der Entwicklung (C.3) von $|\Psi_{\alpha+\gamma}\rangle$ auf -1 gesetzt. Auf diese Weise wird erreicht, dass die Matrix B unabhängig von G und somit nicht vom starken Rauschen in G betroffen ist [245]. Das Ziel des Verfahrens ist die Minimierung des Erwartungswertes der Energie des Variationszustandes in (C.1). Ausgedrückt in der \mathbf{x} -Basis ergibt sich für diesen

$$E_{\alpha} = \frac{\sum_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2} \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}_1) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}_2) \langle \mathbf{x}_1 | \hat{H} | \mathbf{x}_2 \rangle}{\sum_{\mathbf{x}'} |\Psi_{\alpha}(\mathbf{x}')|^2}. \quad (\text{C.13})$$

Dieser Ausdruck kann mithilfe der lokalen Energie umgeschrieben werden zu

$$E_{\alpha} = \sum_{\mathbf{x}} P_{\alpha}(\mathbf{x}) E_{\text{lokal}, \alpha}(\mathbf{x}). \quad (\text{C.14})$$

Wie im Folgenden gezeigt wird, können mithilfe obiger Variationswellenfunktion die Grundzustandsenergie sowie die Korrelationen im Grundzustand des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells sehr gut beschrieben werden. In der ferromagnetischen Phase ergeben sich jedoch Abweichungen bei der Betrachtung des Betrages der Magnetisierung. Um auch dessen Wert in der ferromagnetischen Phase im Grundzustand des Systems beschreiben zu können, wird die Variationswellenfunktion um einen zusätzlichen Variationsparameter α_{μ_B} erweitert, der an den Operator des Betrages der Magnetisierung koppelt. Die Variationswellenfunktion lautet somit

$$|\Psi_{\alpha}\rangle = \exp \left\{ \alpha_{\mu_B} \hat{\mu}_B + \sum_{\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{r}} \delta \hat{C}_{\mathbf{r}}^{xx} \right\} |\uparrow \uparrow \dots \uparrow \uparrow\rangle_z. \quad (\text{C.15})$$

In Abbildung C.1 ist für ein 16×16 -System für verschiedene Verhältnisse h/J die Konvergenz der Variationsparameter dargestellt, die zu Korrelationen gehören, bei denen der Abstand der beiden Spins in Manhattan-Metrik ≤ 4 ist. Die Konvergenz wird über 20 Iterationsschritte betrachtet. In jeder Iteration wird der Monte-Carlo-Mittelwert über 100000 Stichproben gebildet. Die Anzahl der Monte-Carlo-Schritte zwischen zwei Messungen beträgt $2N$. Zwischen zwei Messungen wird somit im Mittel zweimal der Umklapp eines jeden Spins des Systems vorgeschlagen. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, konvergiert das Verfahren sehr schnell. Nach spätestens 10 Iterationen im Falle von $h/J = 3$ haben die Variationsparameter einen konstanten Wert erreicht. Dabei zeigt sich, dass in der ferromagnetischen Phase mit kleiner werdendem Verhältnis h/J Variationsparameter, die zu größeren Abständen der Spins gehören, zunehmend kleiner werden, ihr Beitrag zum Jastrowfaktor sich somit zunehmend dem Faktor 1 nähert. Für $h/J = 0.5$ liegen beispielsweise bereits zwei Größenordnungen zwischen dem Variationsparameter für die Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn und den Korrelationen zwischen Spins, die übernächste Nachbarn darstellen. In der paramagnetischen Phase hingegen ändern sich im untersuchten Parameterbereich von h/J die Werte der Variationsparameter nur geringfügig. Für Verhältnisse $h/J < 0.4$ wird der Algorithmus instabil. Um den Parameterbereich, in dem der Algorithmus angewendet werden kann, auf kleinere Verhältnisse h/J zu erweitern, d. h. weiter in die ferromagnetische Phase zu verschieben, wird die Anzahl der Variationsparameter reduziert. Hierbei wird ausgenutzt, dass für kleine Verhältnisse h/J wie in Abbildung C.1 gezeigt die Korrelationen zwischen weiter voneinander entfernten Spins zunehmend unbedeutender werden gegenüber den Korrelationen zwischen näher benachbarten Spins. In einer groben Vereinfachung werden aus diesem Grund neben dem Betrag der Magnetisierung nur die Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn im Variationszustand berücksichtigt. Die Variationsparameter aller anderen Korrelationen werden auf 0 gesetzt. Der Verlust an Genauigkeit kann dadurch abgeschätzt werden, dass für Verhältnisse von h/J , für die der Algorithmus auch mit dem vollen Satz Variationsparameter stabil läuft, die Ergebnisse verglichen werden. In Abbildung C.2 sind der Verlauf der Grundzustandsenergie pro Spin in Einheiten der Kopplungskonstante J sowie der Verlauf des renormierten Betrages der Magnetisierung in Abhängigkeit von h/J dargestellt. Die Berechnung mithilfe des Verfahrens nach Sorella erfolgt zum einen mit dem vollen Satz Variationsparameter und zum anderen nur unter Berücksichtigung der Korrelation zwischen nächsten Nachbarn sowie des Betrages der Magnetisierung. Darüber hinaus

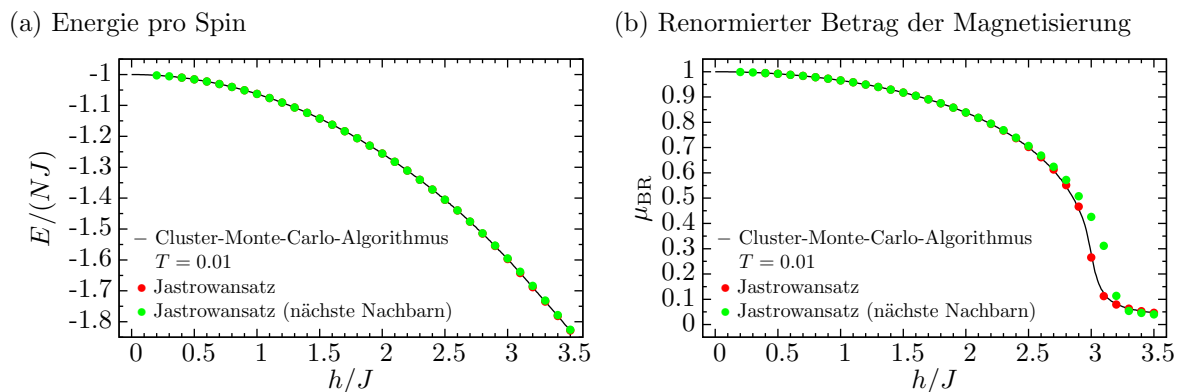


Abbildung C.2: Vergleich des Verlaufs (a) der Energie pro Spin in Einheiten der Kopplungskonstante J (b) des renormierten Betrages der Magnetisierung für das zweidimensionale transversale Ising-Modell auf einem Gitter der Größe 16×16 in Abhängigkeit von h/J bestimmt mithilfe des Algorithmus von Sorella und der Variationswellenfunktion (C.15) unter Berücksichtigung des vollen Satzes an Variationsparametern sowie unter Berücksichtigung nur der Korrelation zwischen nächsten Nachbarn und des Betrages der Magnetisierung. Zusätzlich sind die mithilfe des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus nach Rieger und Kawashima bestimmten Werte der Observablen für das System im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur $T = 0.01$ eingezeichnet. Bei Betrachtung der Energie zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung aller Kurven. Im Falle des renormierten Betrages der Magnetisierung stimmen die Resultate für das thermische System und die Grundzustandserwartungswerte unter Berücksichtigung des vollen Satzes an Variationsparametern ebenfalls sehr gut überein. Werden neben dem Betrag der Magnetisierung hingegen nur die Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt, so zeigen sich Abweichungen in der Nähe des Phasenüberganges bei $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$.

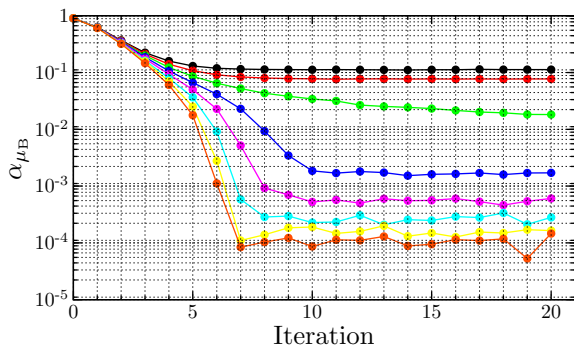


Abbildung C.3: Konvergenz des Variationsparameters α_{μ_B} für verschiedene Verhältnisse h/J in der Nähe des Phasenüberganges bei $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$. Der Farbcode ist \bullet $h/J = 2.8$, \bullet $h/J = 2.9$, \bullet $h/J = 3.0$, \bullet $h/J = 3.1$, \bullet $h/J = 3.2$, \bullet $h/J = 3.3$, \bullet $h/J = 3.4$, \bullet $h/J = 3.5$. α_{μ_B} fällt mit zunehmendem Verhältnis h/J ab. Dabei zeigt sich ein größerer Sprung zwischen $h/J = 3$ (größter betrachteter Wert in der ferromagnetischen Phase) und $h/J = 3.1$ (kleinster betrachteter Wert in der paramagnetischen Phase).

sind mithilfe des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus nach Rieger und Kawashima [209] erzeugte Resultate für das System im thermischen Gleichgewicht für sehr kleine Temperatur ($T = 0.01$) dargestellt. Für dieses wird erwartet, dass sich die Erwartungswerte nur geringfügig von denjenigen des Systems im Grundzustand bei $T = 0$ unterscheiden. Unter Verwendung des vollen Satzes der Variationsparameter ist der Algorithmus für Verhältnisse $h/J \geq 0.4$ stabil. Werden nur Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn und der Betrag der Magnetisierung berücksichtigt, so kann der erreichbare Parameterbereich auf $h/J \geq 0.2$ erweitert werden. Wie ein Vergleich der Kurven zeigt, ergibt sich bei Verwendung des vollen Satzes der Variationsparameter eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Resultaten des Cluster-Monte-Carlo-Algorithmus für das thermische System bei der Temperatur $T = 0.01$ und den Resultaten für den Grundzustand bestimmt mithilfe des Verfahrens nach Sorella. Diese Übereinstimmung betrifft sowohl die Energie als auch den renormierten Betrag der Magnetisierung. Wird der reduzierte Satz Variationsparameter bestehend aus den Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn und dem Betrag der Magnetisierung verwendet, so stimmen die Resultate für die Energie noch immer gut überein. Für den renormierten Betrag der Magnetisierung hingegen zeigen sich in der Nähe des Phasenüberganges bei $(h/J)_{\text{crit}} \approx 3.044$ Abweichungen. Dies kann wiederum durch die am Phasenübergang divergierende Korrelationslänge erklärt werden.

Abschließend soll noch die Konvergenz des zur Berücksichtigung der Betrages der Magnetisierung hinzugefügten Variationsparameters α_{μ_B} untersucht werden. Dieser ist in der ferromagnetischen Phase erforderlich, um den Betrag der Magnetisierung des Systems mithilfe des Variationsverfahrens korrekt zu bestimmen. In der paramagnetischen Phase hingegen ist er nicht erforderlich. Aus diesem Grund gilt es, seinen Einfluss auf das System in der paramagnetischen Phase zu betrachten. Zu diesem Zweck ist in Abbildung C.3 die Konvergenz von α_{μ_B} für verschiedene Verhältnisse h/J sowohl in der ferromagnetischen als auch in der paramagnetischen Phase dargestellt. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, nimmt α_{μ_B} mit zunehmendem Verhältnis h/J ab. Hierbei zeigt sich ein größerer Sprung zwischen dem Wert von α_{μ_B} für $h/J = 3$, dem größten betrachteten Verhältnis h/J , für das sich das System noch in der ferromagnetischen Phase befindet, und $h/J = 3.1$, dem kleinsten betrachteten Verhältnis h/J in der paramagnetischen Phase. Durch den Optimierungsprozess nimmt α_{μ_B} in der paramagnetischen Phase einen sehr kleinen Wert an. Die Variationswellenfunktion (C.15) nähert sich infolgedessen der Ansatzfunktion (C.12) für die paramagnetische Phase an. Somit kann die Variationswellenfunktion (C.15) auch in der paramagnetischen Phase verwendet werden und der Optimierungsprozess bestimmt den zusätzlichen Variationsparameter α_{μ_B} entsprechend.

Mithilfe des Algorithmus von Sorella aus [245] und der Ansatzfunktion (C.15) können somit für einen weiten Bereich von h/J die Korrelationen zwischen Spins sowie der Betrag der Magnetisierung im Grundzustand des zweidimensionalen transversalen Ising-Modells mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Die sich durch die Optimierung ergebenden Werte der Variationsparameter können als Startwerte der Variationsparameter für den Variations-Monte-Carlo-Algorithmus in Realzeit zur Bestimmung der Zeitentwicklung des Systems verwendet werden, wenn der Variationszustand von der Gestalt des Jastrowansatzes gewählt wird. Befindet sich das System vor dem Quench außerhalb der ferromagnetischen Phase und wird durch den Vergleich der Energien vorhergesagt, dass es durch den Quench nicht in die ferromagnetische Phase gelangen wird, so kann der Jastrowansatz ohne Berücksichtigung des Betrages der Magnetisierung verwendet werden.

D Anwendung von Variations-Monte-Carlo in Realzeit auf das eindimensionale transversale Ising-Modell nach Feldquenchs

Die Anwendung des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens auf das eindimensionale transversale Ising-Modell erlaubt einen Vergleich der Resultate des Verfahrens zu exakten Ergebnissen der Freie-Fermionen-Technik. Dieser Vergleich erfolgt im Folgenden für das System nach den Feldquenchs. Für die hierfür erforderlichen Dimensionen $N_{m,n}$ der Unterräume sowie die Anzahl $T_{m,n;m',n'}$ der Übergänge zwischen ihnen existieren im Falle des Systems mit periodischen Randbedingungen analytische Ausdrücke. Die möglichen Kinkzahlen sind ebenfalls bekannt. Für ein System mit N Spins ist

$$n = \begin{cases} 0 & m = 0 \\ 2, 4, \dots, 2m & 0 < m \leq \frac{N}{2} \\ 2, 4, \dots, 2(N - m) & \frac{N}{2} < m < N \\ 0 & m = N \end{cases} . \quad (\text{D.1})$$

Die Bestimmung der Werte der $N_{m,n}$ kann dadurch erfolgen, dass man sich das System in Bereiche zusammenhängender Spin up bzw. Spin down unterteilt vorstellt, denen die Spin up und down des Systems zugeordnet werden. Jeder Bereich muss mindestens einen Spin umfassen. Die Anzahl der Bereiche ist dabei durch die Kinkzahl n bestimmt. Hierbei müssen ebenfalls die periodischen Randbedingungen beachtet werden, durch die sich ein zusammenhängender Bereich an Spin up bzw. Spin down auch über $N \rightarrow 1$ erstrecken kann. In einer Kette mit n Kinks existieren $\frac{n}{2}$ Bereiche mit Spin up sowie $\frac{n}{2}$ Bereiche mit Spin down. Beim Abzählen der möglichen Verteilungen der Spin up und down auf die Bereiche gilt es noch zu berücksichtigen, ob sich ein Bereich über $N \rightarrow 1$ erstreckt. Seine beiden Teilbereiche am linken bzw. rechten Rand der Kette werden bei der kombinatorischen Verteilung der Spin up bzw. Spin down als getrennte Bereiche behandelt, die jeweils mindestens einen Spin umfassen müssen. Es ergeben sich die vier in Tabelle D.1 angegebenen Möglichkeiten der Einteilung der Kette in Bereiche mit Spin up und Spin down.

Position 1	Position N	Anzahl Bereiche Spin up	Anzahl Bereiche Spin down
up	up	$\frac{n}{2} + 1$	$\frac{n}{2}$
down	down	$\frac{n}{2}$	$\frac{n}{2} + 1$
up	down	$\frac{n}{2}$	$\frac{n}{2}$
down	up	$\frac{n}{2}$	$\frac{n}{2}$

Tabelle D.1: Anzahl der Bereiche mit Spin up und Spin down in der eindimensionalen Kette mit periodischen Randbedingungen in Abhängigkeit von der Kinkzahl n .

Die Verteilung der Spin up und Spin down in die Bereiche ergibt schließlich

$$N_{m,n} = \binom{m-1}{\frac{n}{2}-1} \cdot \left[\binom{N-m-1}{\frac{n}{2}} + 2 \binom{N-m-1}{\frac{n}{2}-1} \right] + \binom{m-1}{\frac{n}{2}} \cdot \binom{N-m-1}{\frac{n}{2}-1} . \quad (\text{D.2})$$

Aufgrund der Symmetrie zwischen m und $N - m$ durch Umklapp aller Spins des Systems genügt die Betrachtung von $0 \leq m \leq \frac{N}{2}$. Hieraus ergibt sich die Anzahl $\frac{N^2}{8} + \frac{N}{4} + 1$ an Variationsparametern im Ansatz für die Variationswellenfunktion. Jeder Unterraum (m, n) ist im Falle des eindimensionalen transversalen Ising-Modells mit bis zu 6 anderen Unterräumen durch Umklapp eines einzelnen Spins verbunden. Hierbei ist $\Delta m = \pm 1$ und $\Delta n = 0, \pm 1, \pm 2$. Die Anzahl $T_{m,n;m',n'}$ der Übergänge kann ebenfalls analytisch hergeleitet werden. Den Ausgangspunkt hierzu bildet die Bestimmung der Anzahl isolierter Spin down, d. h. Spin down mit zwei benachbarten Spin up, innerhalb der Zustände des Unterraumes (m, n) . Ihre Anzahl entspricht $T_{m,n;m-1,n-2}$. Dabei ist für $m = 1, n = 2$

$$T_{1,2;0,0} = N , \quad (\text{D.3})$$

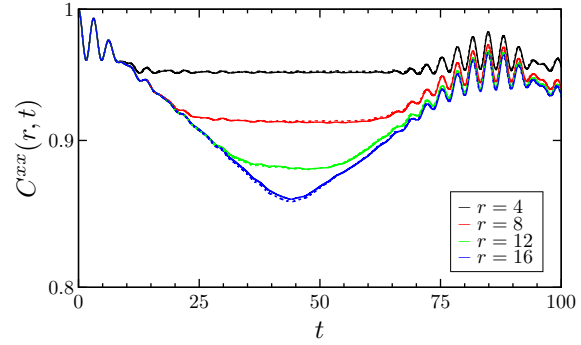
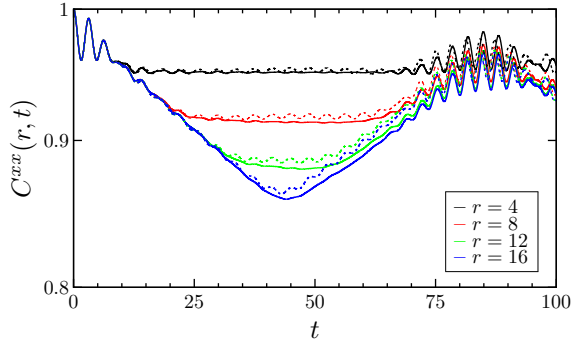
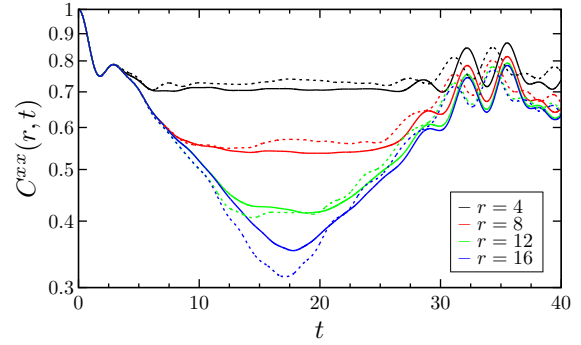
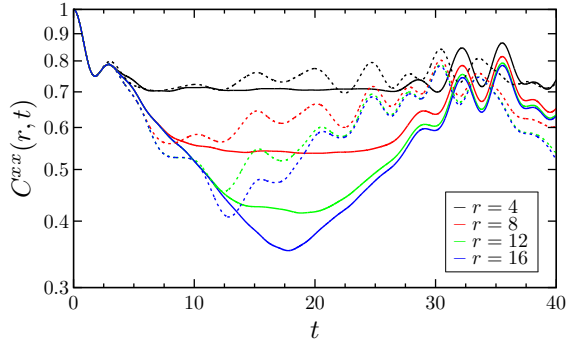
(a) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.2)$

 (b) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$


Abbildung D.1: Vergleich zwischen den exakten Resultaten der Freie-Fermionen-Technik und den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens für den zeitlichen Verlauf der gleichzeitigen Korrelationsfunktion zweier Spins in unterschiedlichen Abständen zueinander innerhalb der Kette der Länge $L = 32$ mit periodischen Randbedingungen nach den Quenchprotokollen (a) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.2)$ und (b) $(1, 0) \rightarrow (1, 0.5)$. In den Graphen der linken Spalte werden in der Ansatzfunktion des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens nur die Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt, in den Graphen der rechten Spalte zusätzlich die Korrelationen zwischen übernächsten Nachbarn. Für den schwachen Quench zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Resultate des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens zu den exakten Resultaten, wohingegen sich für den stärkeren Quench größere Abweichungen ergeben. Die Berücksichtigung übernächster Nachbarn verbessert die Übereinstimmung bedeutend, führt jedoch nicht zum vollständigen Verschwinden der Abweichungen nach dem Quenchprotokoll in (b).

für $m > 1$ und $n = 2m$ ist

$$T_{m,2m;m-1,2m-2} = m \cdot \left[\binom{N-m-1}{\frac{n}{2}} + 2 \binom{N-m-1}{\frac{n}{2}-1} \right] \quad (\text{D.4})$$

sowie für $n < 2m$

$$\begin{aligned} T_{m,n;m-1,n-2} &= \left[\sum_{j=\max(0,n-m)}^{\frac{n}{2}-1} j \binom{\frac{n}{2}}{j} \cdot \binom{m-\frac{n}{2}-1}{\frac{n}{2}-1-j} \right] \cdot \left[\binom{N-m-1}{\frac{n}{2}} + 2 \binom{N-m-1}{\frac{n}{2}-1} \right] \\ &+ \left[\sum_{j=\max(0,n-m)}^{\frac{n}{2}-1} j \binom{\frac{n}{2}-1}{j} \cdot \binom{m-\frac{n}{2}}{\frac{n}{2}-j} \right] \cdot \binom{N-m-1}{\frac{n}{2}-1}. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Die Anzahl der Spin down mit genau einem benachbarten Spin up ergibt sich zu

$$T_{m,n;m-1,n} = n \cdot N_{m,n} - 2T_{m,n;m-1,n-2} \quad (\text{D.6})$$

und die Anzahl der Spin down ohne benachbarte Spin up lautet schließlich

$$\begin{aligned} T_{m,n;m-1,n+2} &= m \cdot N_{m,n} - 2T_{m,n;m-1,n-2} - [n \cdot N_{m,n} - 2T_{m,n;m-1,n-2}] \\ &= (m-n) \cdot N_{m,n} + T_{m,n;m-1,n-2}. \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Die Anzahl der Übergänge $m \rightarrow m+1$ ergibt sich aus obigen Ergebnissen durch die Ersetzung $m \rightarrow N-m$. Mithilfe der Werte von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ können die Koeffizienten $t_{m,n;m',n'}$ in den Bewegungsgleichungen der Variationsparameter bestimmt und die Bewegungsgleichungen durch numerische Integration gelöst werden. In Abbildung D.1 (a) ist der Vergleich der Resultate für die Zeitentwicklung der gleichzeitigen Korrelationsfunktion für unterschiedliche Abstände der beiden betrachteten Spins im System der Länge $L = 32$ mit periodischen Randbedingungen nach den Quenches $(1,0) \rightarrow (1,0.2)$ sowie $(1,0) \rightarrow (1,0.5)$ dargestellt. In diesem System entspricht der maximale Abstand zweier Spins gerade dem maximalen Abstand zweier Spins im 16×16 -System, dem größten in zwei Dimensionen betrachteten System. Ein Vergleich der exakten Resultate zu den Resultaten des Variations-Monte-Carlo-Verfahrens offenbart insbesondere für den stärkeren der beiden betrachteten Quenches deutliche Abweichungen. Diese Abweichungen waren für das eindimensionale transversale Ising-Modell zu erwarten, da einerseits die Anzahl der Symmetrien innerhalb des Systems geringer ist und andererseits der Ansatz zur Beschreibung der Feldquenches vom Vorhandensein ferromagnetischer Ordnung ausgeht. Diese wird jedoch im eindimensionalen transversalen Ising-Modell im Gegensatz zum zweidimensionalen transversalen Ising-Modell durch jeden Quench zerstört. Im System im thermodynamischen Limes ergibt sich infolgedessen ein exponentieller Abfall der Korrelationen. Im transversalen Ising-Modell in zwei Dimensionen hingegen wurde durch energetische Betrachtung gezeigt, dass das System bis zu einer gewissen Stärke der Feldquenches die ferromagnetische Phase nicht verlässt. Unter Berücksichtigung nicht nur der Orientierung der nächsten Nachbarn, sondern auch der übernächsten Nachbarn, können die Ergebnisse für das eindimensionale transversale Ising-Modell verbessert werden. Durch diesen Ansatz erfolgt eine feinere Einteilung des Hilbertraumes in Unterräume. Als zusätzliche Parameter kommen neben der Anzahl m an Spin down und der Anzahl n an Kinks die Anzahl d isolierter Spin down sowie die Anzahl u isolierter Spin up hinzu. Die Dimensionen der Unterräume sowie die Übergänge zwischen ihnen können für diese Unterteilung des Hilbertraumes jedoch auch für das eindimensionale System nicht mehr analytisch angegeben werden, sondern müssen durch Untersuchung jeder möglichen Konfiguration des Systems bestimmt werden. Hierdurch wird die maximal mögliche Systemgröße beschränkt. Zudem steigt der Rechenaufwand zur numerischen Integration der Bewegungsgleichungen stark an. In zwei Dimensionen ist diese Erweiterung nicht möglich, da zu viele unterschiedliche Unterräume betrachtet werden müssten. Für das eindimensionale transversale Ising-Modell ergibt sich jedoch für die erreichbaren Systemgrößen eine signifikante Verbesserung der Resultate, wie Abbildung D.1 (b) entnommen werden kann.

E Bestimmung der Koeffizienten der Bewegungsgleichungen der Variationsparameter nach den Feldquenchs

Zur Bestimmung der Koeffizienten $t_{m,n;m',n'}$ in den Bewegungsgleichungen (4.125) der Variationsparameter nach den Feldquenchs ist die Kenntnis der Dimensionalität $N_{m,n}$ der Unterräume des Hilbertraumes sowie der Anzahl der Übergänge $T_{m,n;m',n'}$ zwischen ihnen erforderlich. Hierzu wird ein Rare Event Sampling-Verfahren nach Alexander Hartmann verwendet [246]. Dieses wird im Folgenden zunächst allgemein erläutert, bevor anschließend auf seine Anwendung auf das vorliegende Problem eingegangen wird.

Grundlagen des Rare Event Samplings

Die Konfigurationen des allgemeinen betrachteten Systems werden mit c bezeichnet. Jeder Konfiguration c wird ein Wert $S(c)$ zugeordnet, der eindeutig durch die Konfiguration bestimmt ist. Durch das Rare Event Sampling-Verfahren nach Hartmann werden die Häufigkeiten $p(S)$ der verschiedenen auftretenden Werte von S bestimmt. Die Erzeugung der Konfigurationen erfolgt als Markow-Kette $c_1 \rightarrow c_2 \rightarrow \dots \rightarrow c_n$. Gegenüber einem einfachen Monte-Carlo-Verfahren wird die Effizienz des Algorithmus dadurch gesteigert, dass die Schätzfunktion derart verändert wird, dass die Verteilung der Konfigurationen in jeder beliebigen Region des Konfigurationsraumes konzentriert werden kann. Ein vorgeschlagener Übergang in eine neue Konfiguration entlang der Markow-Kette wird somit mit größerer Wahrscheinlichkeit akzeptiert, wenn die vorgeschlagene Konfiguration zu dem Teil des Konfigurationsraumes gehört, in den die Erzeugung der Stichproben durch Änderung der Schätzfunktion verschoben werden soll. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit eines Überganges $c \rightarrow c'$ ist dabei durch die Metropolis-Wahrscheinlichkeit $p_{\text{akz}}(c \rightarrow c') = \min\{1, \exp(\beta\Delta S)\}$ mit $\Delta S = S(c') - S(c)$ gegeben [251]. Dies entspricht der Bestimmung von Erwartungswerten gemäß dem kanonischen Gibbs Ensemble für ein System, das sich bei der Temperatur $T = 1/\beta$ und der Energie $E = -S$ im Gleichgewicht befindet, wobei die Verteilung mit den Wahrscheinlichkeiten $P(c)$ der Konfigurationen gewichtet ist. Die aus der statistischen Physik bekannte Gleichgewichtsverteilung $Q(c)$ ist dann gegeben durch

$$Q(c) = P(c) \frac{\exp\{\beta S(c)\}}{Z} \quad (\text{E.1})$$

mit der Zustandssumme

$$Z = \sum_c P(c) \exp\{\beta S(c)\}. \quad (\text{E.2})$$

Auf diese Weise folgt für den Schätzer für die Wahrscheinlichkeit von S im gewichteten Ensemble

$$p^*(S) = \frac{1}{Z} \sum_c' \exp\{\beta S(c)\} P(c) = \frac{\exp\{\beta S\}}{Z} \sum_c' P(c). \quad (\text{E.3})$$

Hierbei bezeichnet \sum' die Summation über alle Konfigurationen, die den Wert S ergeben. Somit kann ausgehend von den numerisch bestimmten Häufigkeiten $p^*(S)$ der Schätzer für die ungewichtete Verteilung gemäß

$$p(S) = \sum_c' P(c) = p^*(S) Z \exp\{-\beta S\} \quad (\text{E.4})$$

bestimmt werden. Die Zustandssumme Z ist hierbei a priori unbekannt, kann jedoch dadurch bestimmt werden, dass zunächst Stichproben mithilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens mit der ungewichteten Schätzfunktion (*Simple Sampling*) erzeugt werden. Anschließend werden Stichproben mithilfe des Monte-Carlo-Verfahrens mit der gewichteten Schätzfunktion (*Biased Sampling*) erzeugt. Bei geeigneter Wahl der gewichteten Schätzfunktion ergibt sich ein Intervall $[S_1, S_2]$, auf dem sowohl das Monte-Carlo-Verfahren mit der ungewichteten Schätzfunktion als auch das Monte-Carlo-Verfahren mit der gewichteten Schätzfunktion vertrauenswürdige Ergebnisse liefern. Die durch Simple Sampling bestimmten Werte von $p(S)$ sowie die gemäß (E.4) aus den Resultaten des Biased Samplings bestimmten Werte von $p(S)$ müssen auf diesem Intervall übereinstimmen. Z wird infolgedessen derart gewählt, dass die Abweichungen zwischen

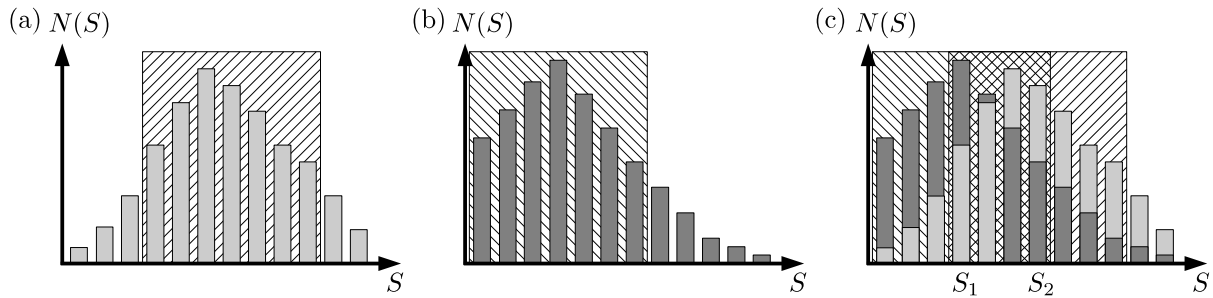


Abbildung E.1: (a) Erzeugung von Stichproben gemäß der ungewichteten Schätzfunktion (Simple Sampling). Der schraffierte Bereich gibt die Werte von S an, für die die Resultate als vertrauenswürdig angesehen werden können. (b) Erzeugung von Stichproben gemäß der gewichteten Schätzfunktion (Rare Event Sampling). Die Verschiebung erfolgt im betrachteten Beispiel hin zu kleineren Werten von S . Der schraffierte Bereich gibt wiederum die Werte von S an, für die die Resultate als vertrauenswürdig angesehen werden können. (c) Der Bereich $[S_1, S_2]$ an Werten, für die sowohl die Resultate der Erzeugung von Stichproben gemäß der ungewichteten als auch der gewichteten Schätzfunktion vertrauenswürdig sind, kann zur Bestimmung der Zustandssumme Z verwendet werden, indem Z derart gewählt wird, dass die Abweichung der Resultate für $p(S)$ auf $[S_1, S_2]$ minimal wird.

dem Werten von $p(S)$ für $S \in [S_1, S_2]$ minimal werden. Das Verfahren ist in Abbildung E.1 veranschaulicht. Zunächst werden in (a) Stichproben gemäß der ursprünglichen Schätzfunktion erzeugt. Der schraffierte Bereich bezeichnet die Werte von S , für die hinreichend viele Stichproben erzeugt wurden und die Ergebnisse als vertrauenswürdig angesehen werden können. In der Abbildung existiert sowohl für große als auch für kleine Werte von S ein Bereich, in dem die Resultate des Simple Samplings nicht vertrauenswürdig sind. In dem Beispiel soll nun der Bereich kleiner Werte von S genauer untersucht werden. Durch geeignete Änderung der Schätzfunktion werden in (b) bevorzugt Stichproben für kleine Werte von S erzeugt. Der Bereich der Werte von S , in dem die Resultate vertrauenswürdig sind, ist wiederum durch die schraffierte Fläche hervorgehoben. Um nun die Wahrscheinlichkeiten $p(S)$ gemäß der ursprünglichen Schätzfunktion für kleine S zu erhalten, wird in (c) das Intervall $[S_1, S_2]$ bestimmt, in dem die Resultate sowohl des Simple Samplings als auch des Biased Samplings vertrauenswürdig sind. Dieses Intervall wird genutzt, um nach (E.4) die Zustandssumme zu bestimmen, mit der anschließend aus den durch das Biased Sampling bestimmten Wahrscheinlichkeiten $p^*(S)$ für kleine Werte von S die Wahrscheinlichkeiten $p(S)$ gemäß der ungewichteten Schätzfunktion gewonnen werden können. In dem in Abbildung E.1 veranschaulichten Beispiel wurden bereits durch einmalige Anwendung von Biased Sampling für alle kleinen Werte von S vertrauenswürdige Ergebnisse erzeugt. Im Allgemeinen werden mehrere Durchläufe Biased Sampling mit jeweils weiter angepasster Schätzfunktion erforderlich sein, um alle Werte von S abzudecken. Zur Bestimmung der Zustandssumme werden jeweils die im vorherigen Durchlauf mithilfe des Biased Samplings bestimmten Werte von $p(S)$ verwendet.

Anwendung des Rare Event Sampling auf das zweidimensionale transversale Ising-Modell

Nach der Beschreibung der Idee sowie der Grundlagen des Rare Event Sampling-Verfahrens nach Hartmann soll nun auf seine konkrete Anwendung zur Bestimmung der $t_{m,n;m',n'}$ eingegangen werden. Die Anwendung des Monte-Carlo-Verfahrens erfolgt jeweils für Unterräume mit einer festen Anzahl m an Spin down. Für das gegebene m werden die Dimensionalität $N_{m,n}$ der Unterräume des Hilbertraumes sowie die Anzahl der Übergänge $T_{m,n;m',n'}$ zwischen benachbarten Unterräumen für alle möglichen Werte n der Kinkzahl bestimmt und hieraus nach (4.126) die Koeffizienten $t_{m,n;m',n'}$ in den Bewegungsgleichungen der Variationsparameter. Die Betrachtungen erfolgen in der \mathbf{x} -Basis. Die Konfigurationen des Systems werden aus diesem Grund mit \mathbf{x} bezeichnet. Da es sich bei der Bestimmung der $N_{m,n}$ und der $T_{m,n;m',n'}$ um ein rein kombinatorisches Problem handelt, hat in der ungewichteten Schätzfunktion jede Konfiguration des Systems die gleiche Wahrscheinlichkeit. Bei Betrachtung aller Zustände des Hilbertraumes ist diese Wahrscheinlichkeit für das System mit N Spins durch $P(\mathbf{x}) = 1/2^N$ gegeben. Ist hingegen die Anzahl m der Spin down festgelegt wie bei dem im Folgenden beschriebenen Verfahren, wird also die Vereinigung aller Unterräume (m, n) des Hilbertraumes mit einem festen Wert von m betrachtet, so

beträgt die Wahrscheinlichkeit eines jeden Zustandes in diesem Unterraum $P_m(\mathbf{x}) = \binom{N}{m}^{-1}$. Für das Simple Sampling hat somit jede Konfiguration des Systems die gleiche Wahrscheinlichkeit und infolgedessen wird jeder vorgeschlagene Monte-Carlo-Schritt akzeptiert. Es wird hierbei nicht $p(S)$ bestimmt wie in der allgemeinen Formulierung des Verfahrens nach Hartmann in [246], sondern $p_m(n)$. Dabei ist $p_m(n)$ die Wahrscheinlichkeit einer beliebigen Konfiguration mit n Kinks im Unterraum der Konfigurationen mit m Spin down. S hängt für das Biased Sampling nur über die Kinkzahl n von der Konfiguration \mathbf{x} des Systems ab und es ist möglich, dass unterschiedliche Werte von n den gleichen Wert von S ergeben. Während in [246] lediglich durch Änderung der inversen Temperatur $\beta = 1/T$ auf die Verteilung der erzeugten Stichproben Einfluss genommen wurde, wird im vorliegenden Fall auch S selbst verändert, um die Erzeugung der Stichproben in den gewünschten Bereich des Konfigurationsraumes zu verschieben. Die genaue Form von S als Funktion der Kinkzahl kann dabei frei gewählt werden, da die Resultate gemäß (E.4) auf die ursprüngliche, ungewichtete Schätzfunktion umgerechnet werden. Bei der Wahl von S liegt der Fokus aus diesem Grund allein auf einer möglichst hohen Effizienz des Verfahrens, d. h. der Erzeugung von Stichproben in dem Bereich der gesuchten Kinkzahlen. Die Wahl der genauen Form von S beruht auf Erfahrungswerten und Versuchen mit verschiedenen Ansätzen. Zu diesem Zweck wird das 6×6 -System betrachtet. Bei diesem handelt es sich um das größte System, für das noch alle Konfigurationen des Hilbertraumes explizit erzeugt und hieraus die exakten Werte von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ bestimmt werden können. Ein Vergleich der Laufzeiten mit unterschiedlich gewählten Ansätzen für S im Rahmen des Rare Event Samplings hat ergeben, dass für Kinkzahlen kleiner als die am häufigsten auftretende Kinkzahl für gegebenes m

$$S(n, n_0) = \begin{cases} 0 & \text{falls } n \leq n_0 \\ -(n - n_0)^2 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

eine gute Wahl von S darstellt, während für Kinkzahlen größer als die am häufigsten auftretende Kinkzahl für gegebenes m

$$S(n, n_0) = -(n - n_0)^2 \quad (\text{E.6})$$

zur Bestimmung der $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ gewählt wird. Durch n_0 wird hierbei das Maximum der durch das Biased Sampling erzeugten Verteilung verschoben, während Erhöhung der inversen Temperatur β die Verteilung schmaler macht, sodass die Kinkzahlen der erzeugten Stichproben näher bei n_0 liegen. n_0 wird dabei derart gewählt, dass es der nächstkleinere bzw. der nächstgrößere mögliche Wert von n zum kleinsten bzw. größten Wert von n ist, für den die Ergebnisse bereits akzeptiert worden sind. Der Schätzer für die Wahrscheinlichkeit der Kinkzahl n bei vorgegebenem Wert von m im gewichteten Ensemble ist durch

$$p_m^*(n) = \frac{1}{Z_m} \sum_{\mathbf{x}}^{(m,n)} P_m(\mathbf{x}) \exp \{ \beta S(n(\mathbf{x}), n_0) \} = \frac{\exp \{ \beta S(n, n_0) \}}{Z_m} \binom{N}{m}^{-1} N_{m,n} . \quad (\text{E.7})$$

gegeben mit $\sum_{\mathbf{x}}^{(m,n)}$ der Summation über alle Konfigurationen des Systems mit m Spin down sowie n Kinks und der Zustandssumme

$$Z_m = \sum_{\mathbf{x}}^{(m)} P_m(\mathbf{x}) \exp \{ \beta S(n(\mathbf{x}), n_0) \} = \binom{N}{m}^{-1} \sum_{\mathbf{x}}^{(m)} \exp \{ \beta S(n(\mathbf{x}), n_0) \} \quad (\text{E.8})$$

mit $\sum_{\mathbf{x}}^{(m)}$ der Summation über alle Konfigurationen des Systems mit m Spin down. Ausgehend von den numerisch bestimmten Häufigkeiten $p_m^*(n)$ kann der Schätzer für die ungewichtete Verteilung über

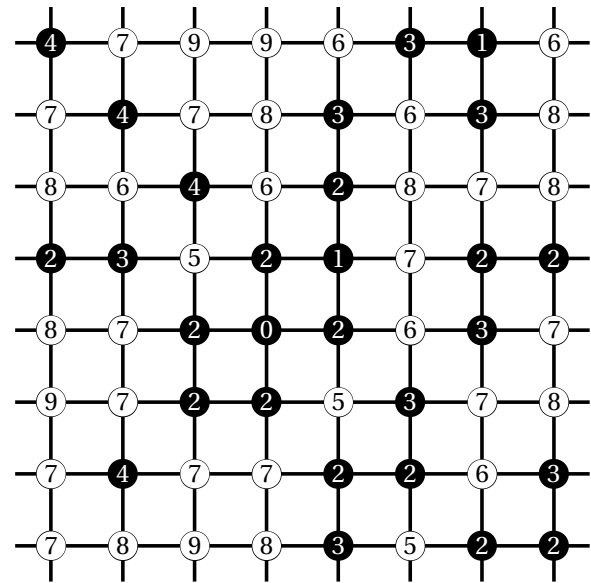
$$p_m(n) = \sum_{\mathbf{x}}^{(m,n)} P_m(\mathbf{x}) = \binom{N}{m}^{-1} N_{m,n} = p_m^*(n) Z_m \exp \{ -\beta S(n, n_0) \} \quad (\text{E.9})$$

bestimmt werden. Die gesuchten Werte der $N_{m,n}$ ergeben sich also aus

$$N_{m,n} = \binom{N}{m} p_m^*(n) Z_m \exp \{ -\beta S(n, n_0) \} . \quad (\text{E.10})$$

Der gleiche Umrechnungsfaktor wird auch zur Bestimmung der Werte der $T_{m,n;m',n'}$ aus den Resultaten

Abbildung E.2: Beispiel für eine Konfiguration des 8×8 -Systems. Schwarze Kreise symbolisieren Spin down, weiße Kreise Spin up. Die dargestellte Konfiguration hat $m = 28$ Spin down und $n = 68$ Kinks. Im Rahmen des Algorithmus zum Rare Event Sampling wird die aktuelle Konfiguration des Systems in Form von Bool-Variablen in einem Array gespeichert (Spin down=false, Spin up=true) und ihre Positionen innerhalb des Gitters zusätzlich in zwei Listen abgelegt. Die ganzzahligen Werte auf jeder Position geben die Orientierung des betrachteten Spins sowie seiner vier nächsten Nachbarn an, die separat in einem Integer-Array gespeichert werden. Startwert bei der Bestimmung der Zahlen ist 0 für einen Spin down. Ist der betrachtete Spin up, so ergibt sich +5. Jeder benachbarte Spin up ergibt weiterhin +1. Die möglichen Werte laufen somit von 0 bis 9. Ihre jeweilige Anzahl wird ebenfalls in einer Liste gespeichert und ist von Bedeutung für die Bestimmung der Beiträge der Konfiguration zu den $T_{m,n;m',n'}$.



des Rare Event Samplings verwendet. Über die Vertrauenswürdigkeit der aus den erzeugten Stichproben bestimmten Resultate für $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ wird dabei entschieden, indem ausgehend von unterschiedlichen Seeds des Mersenne-Twisters [250] verschiedene Markow-Ketten mit Konfigurationen erzeugt werden und die Werte von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ als Mittelwerte über die unterschiedlichen Markow-Ketten bestimmt werden. Ist dabei das Verhältnis von Standardabweichung zu Mittelwert von $N_{m,n}$ kleiner als ein vorgegebener Grenzwert und wurde weiterhin eine vorgegebene Mindestanzahl an Stichproben für den betrachteten Wert von n erzeugt, so werden die Resultate für den Wert von n als vertrauenswürdig betrachtet und akzeptiert. Die Mindestanzahl an Stichproben zu einem Wert von n sowie der Grenzwert für das Verhältnis von Standardabweichung zu Mittelwert beruht dabei wieder auf Erfahrungswerten und dem Vergleich zu den exakten Werten von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ für das 6×6 -System. Im Rahmen des im Folgenden beschriebenen Algorithmus werden für jeden Durchlauf des Simple Samplings bzw. des Biased Samplings Stichproben mit 20 verschiedenen Seeds erzeugt. Die Anzahl der erzeugten Stichproben zu jedem Seed beträgt $2 \cdot 10^8$. Die Werte für $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ werden als vertrauenswürdig betrachtet, wenn das Verhältnis von Standardabweichung zu Mittelwert von $N_{m,n}$ für den betrachteten Wert von n kleiner als 10^{-3} ist. Dabei müssen nur $m \leq \frac{N}{2}$ betrachtet werden. Die Werte für $m > \frac{N}{2}$ ergeben sich durch Vertauschung der Orientierung up und down aller Spins des Systems gemäß $N_{m,n} = N_{N-m,n}$ sowie $T_{m,n;m',n'} = T_{N-m,n;N-m',n'}$

Wie bereits zu Beginn der Beschreibung des Algorithmus erwähnt wurde, erfolgt die Erzeugung der Stichproben immer im Unterraum der Zustände mit einer festen Anzahl m an Spin down. Eine effiziente Möglichkeit dafür, entlang der Markow-Kette nur Stichproben mit dem gleichen Wert von m zu erzeugen, besteht darin, ausgehend von einer zufällig gewählten Anfangskonfiguration mit m Spin down in jedem Monte-Carlo-Schritt die Vertauschung eines Spin up und eines Spin down des System vorzuschlagen. Auf diese Weise bleibt m konstant und es kann nur die Kinkzahl n durch die Vertauschung verändert werden. Die Implementierung dieses Verfahrens wird im Folgenden beschrieben. Zur Erzeugung der Anfangskonfiguration des Systems wird mithilfe des Mersenne-Twisters [250] eine Anzahl an Zufallszahlen erzeugt, die der Anzahl m an Spin down entspricht. Die Zufallszahlen liegen gleichverteilt im Intervall $(0, 1)$. Durch Multiplikation mit der Systemgröße N und Abrunden auf die nächstkleinere natürliche Zahl werden die Positionen der Spin down innerhalb des Systems bestimmt. Die Konfiguration des Systems wird in Form eines Bool-Arrays gespeichert. Hierbei bezeichnet true einen Spin up und false einen Spin down. Zusätzlich werden die Positionen der Spin up und Spin down in zwei aufsteigend geordneten Listen gespeichert und es wird ein zweites Array mit Integer-Variablen angelegt, dessen Einträge die Orientierung des Spins an einer gegebenen Position sowie die seiner vier nächsten Nachbarn nach folgendem Schema klassifizieren: Ein Spin down erhält den Wert 0, ein Spin up den Wert 5. Für jeden nächsten Nachbarn in der Orientierung up wird 1 zu dem Eintrag des Arrays hinzuaddiert. Es ergeben sich somit die möglichen

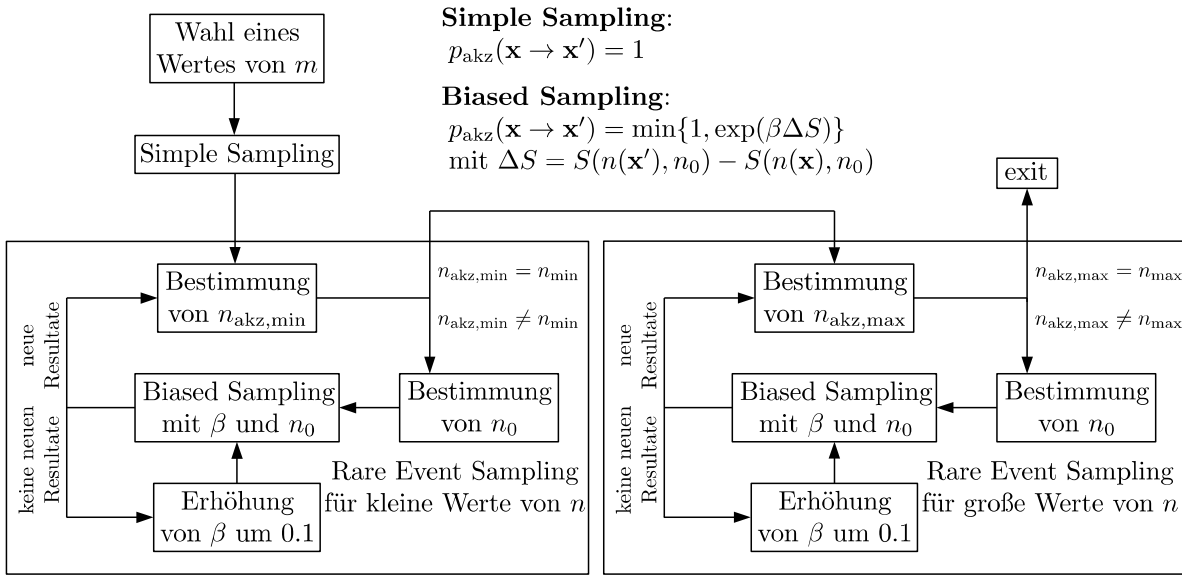


Abbildung E.3: Schematische Darstellung des Ablaufs des Algorithmus zur Bestimmung der Werte aller $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ für einen gegebenen Wert von m .

Einträge 0 (Spin down mit vier benachbarten Spin down) bis 9 (Spin up mit vier benachbarten Spin up) des Arrays. Ein Beispiel für die beiden Arrays ist in Abbildung E.2 gegeben. Die Anzahl der Werte 0 bis 9 wird ebenfalls in einer Liste gespeichert. Aus ihnen kann gemäß Tabelle 4.3 der Beitrag der Konfiguration zu den Übergängen $T_{m,n;m',n'}$ zwischen den Unterräumen bestimmt werden. Zuletzt wird die Kinkzahl n der Konfiguration bestimmt und ebenfalls abgespeichert.

In jedem Monte-Carlo-Schritt werden zwei Zufallszahlen erzeugt, die die Positionen des Spin up und des Spin down im System bestimmen, deren Vertauschung vorgeschlagen wird. Zu diesem Zweck wird die eine der beiden Zufallszahlen mit m multipliziert und auf die nächstkleinere natürliche Zahl abgerundet, um aus der Liste der Positionen der Spin down innerhalb des Systems die Position des Spin down zu bestimmen, der vertauscht werden soll. Auf die gleiche Weise wird mit der zweiten Zufallszahl und der Liste der Spin up verfahren, wobei hier die Multiplikation mit $N - m$ zu erfolgen hat. Im Falle des Simple Samplings wird jede vorgeschlagene Vertauschung des Spin up und des Spin down akzeptiert, da jede Konfiguration des Systems die gleiche Wahrscheinlichkeit hat. Im Falle des Biased Samplings hingegen muss die Änderung der Kinkzahl des Systems durch den Monte-Carlo-Schritt bestimmt werden, da diese über S Einfluss auf die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Schrittes hat. Hierzu müssen nur die beiden Spins, deren Vertauschung vorgeschlagen wurde, sowie ihre nächsten Nachbarn betrachtet werden, um ausgehend von der bekannten Kinkzahl der aktuellen Konfiguration die Kinkzahl der vorgeschlagenen Konfiguration zu berechnen. Bezeichnet n_d den Beitrag des Spin down, dessen Vertauschung vorgeschlagen wurde, sowie seiner vier nächsten Nachbarn zur Gesamtzahl n der Kinks des Systems und n_u den entsprechenden Beitrag für den Spin up, so ist die Änderung Δn der Gesamtzahl der Kinks des Systems durch die durch den Monte-Carlo-Schritt vorgeschlagene Vertauschung der Position des Spin up und des Spin down gegeben durch

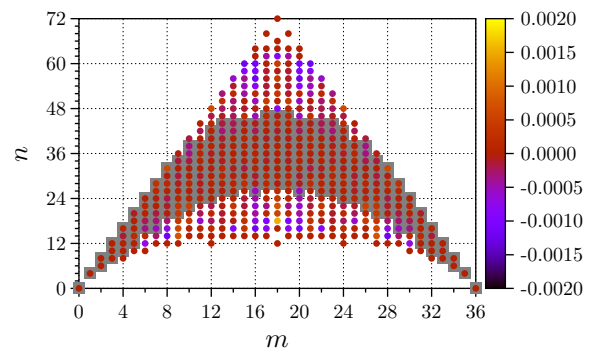
$$\Delta n = 10 - 2 \cdot (n_d + n_u) \tag{E.11}$$

falls der Spin down und der Spin up keine nächste Nachbarn sind und durch

$$\Delta n = 8 - 2 \cdot (n_d + n_u) \tag{E.12}$$

andernfalls. Die Kinkzahl der vorgeschlagenen Konfiguration ergibt sich dann aus der Kinkzahl der aktuellen Konfiguration durch Addition von Δn . Mit dieser kann der Wert von S der neuen Konfiguration gemäß (E.5) bzw. (E.6) und damit über ΔS die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Monte-Carlo-Schrittes bestimmt werden. Um zu entscheiden, ob der Schritt akzeptiert wird, wird wiederum eine Zufallszahl erzeugt.

Abbildung E.4: Relativer Fehler der durch das beschriebene Monte-Carlo-Verfahren unter Verwendung von Rare Event Sampling bestimmten Werte von $N_{m,n}$ für das 6×6 -System. Die relative Abweichung zu den exakten Resultaten beträgt für die betrachtete Systemgröße für alle möglichen Werte (m, n) weniger als 0.2%. Für das Monte-Carlo-Verfahren wurden die im Text angegebenen Parameter verwendet. Die grau hinterlegten Datenpunkte bezeichnen die Werte von $N_{m,n}$, für die bereits durch das Simple Sampling vertrauenswürdige Resultate erzeugt wurden.



Der schematische Ablauf des Algorithmus zur Bestimmung aller $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ für einen gegebenen Wert von m ist in Abbildung E.3 schematisch dargestellt und kann wie folgt zusammengefasst werden. Nach Festlegung des Wertes von m wird ein Durchlauf Simple Sampling ausgeführt und alle Werte von n bestimmt, für die die Resultate für $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ vertrauenswürdige sind. Bezeichne dabei $n_{\text{akz,min}}$ den kleinsten Wert von n , für den dies der Fall ist, und $n_{\text{akz,max}}$ den größten. Es werden nun zunächst mithilfe von Rare Event Sampling $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ für $n < n_{\text{akz,min}}$ bestimmt. Zu diesem Zweck wird n_0 auf die nächstkleinere mögliche Kinkzahl gegenüber $n_{\text{akz,min}}$ und β auf den Wert 0.1 für den ersten Durchlauf des Biased Samplings gesetzt. Im Folgenden ergeben sich nach der Bestimmung der Werte von n , für die nach dem Biased Sampling vertrauenswürdige Werte für $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ hinzugekommen sind, zwei Möglichkeiten. Wurden nach dem Durchlauf des Biased Samplings für keine neuen Werte von n die Resultate für $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ akzeptiert, so wird die inverse Temperatur β um 0.1 erhöht, um die erzeugte Verteilung schmäler zu machen. Andernfalls wird der neue Wert von $n_{\text{akz,min}}$ bestimmt und n_0 für den nächsten Durchlauf Biased Sampling wieder auf die nächstkleinere mögliche Kinkzahl gegenüber $n_{\text{akz,min}}$ gesetzt. Dieses Verfahren wird wiederholt, bis für alle Kinkzahlen, die kleiner als diejenigen sind, für die mithilfe des Simple Samplings vertrauenswürdige Werte von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ bestimmt werden konnten, Resultate akzeptiert wurden. Im Anschluss daran wird β wieder auf 0.1 gesetzt und analog für große Kinkzahlen verfahren.

In Abbildung E.4 ist der relative Fehler der Resultate des Monte-Carlo-Verfahrens für die $N_{m,n}$ für das 6×6 -System dargestellt. Wie der Abbildung entnommen werden kann, besteht eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den exakten Resultaten und den mithilfe des beschriebenen Monte-Carlo-Verfahrens unter Verwendung von Rare Event Sampling bestimmten Werten.

Die Abbildungen E.5 bis E.8 zeigen die Werte der $t_{m,n;m',n'}$ für die betrachteten Systemgrößen 4×4 , 8×8 , 12×12 sowie 16×16 . Während die Resultate für das 4×4 -System noch durch Abzählen bestimmt werden konnten, wurde für die größeren Systeme das beschriebene Monte-Carlo-Verfahren angewendet. Ein Vergleich der Werte der $t_{m,n;m',n'}$ für verschiedene Systemgrößen zeigt bei Betrachtung von m und n in Einheiten von N eine Übereinstimmung der Struktur der Koeffizienten. Weiterhin ist $t_{m,n;m',n'} = t_{N-m,n;N-m',n'}$. Die Gesamtlaufzeit des Algorithmus hängt entscheidend von dem betrachteten Wert von m ab, da für ein gewähltes m die Werte von $N_{m,n}$ und $T_{m,n;m',n'}$ für alle zugehörigen n bestimmt werden. Zudem ist a priori die notwendige Anzahl an Durchläufen des Biased Samplings, um für alle Werte von n vertrauenswürdige Ergebnisse zu erzeugen, nicht bekannt. Die Laufzeit für einen einzelnen Durchlauf des Biased Samplings kann hingegen angegeben werden. Für die zur Erzeugung der in den Abbildungen gezeigten Werte von $t_{m,n;m',n'}$ verwendete Anzahl von $2 \cdot 10^8$ Stichproben je Durchlauf des Biased Samplings ist auf einem einzelnen Kern eines Intel Xeon E5-2680 v2, der mit 2,8 GHz taktet, eine Laufzeit von etwa 90s erforderlich. Für den Wert von m mit der längsten Laufzeit zur Bestimmung aller zugehörigen $t_{m,n;m',n'}$ hat sich im Falle des 16×16 -Systems bei Verwendung eines einzelnen Kernes eine Laufzeit von etwa drei Wochen ergeben.

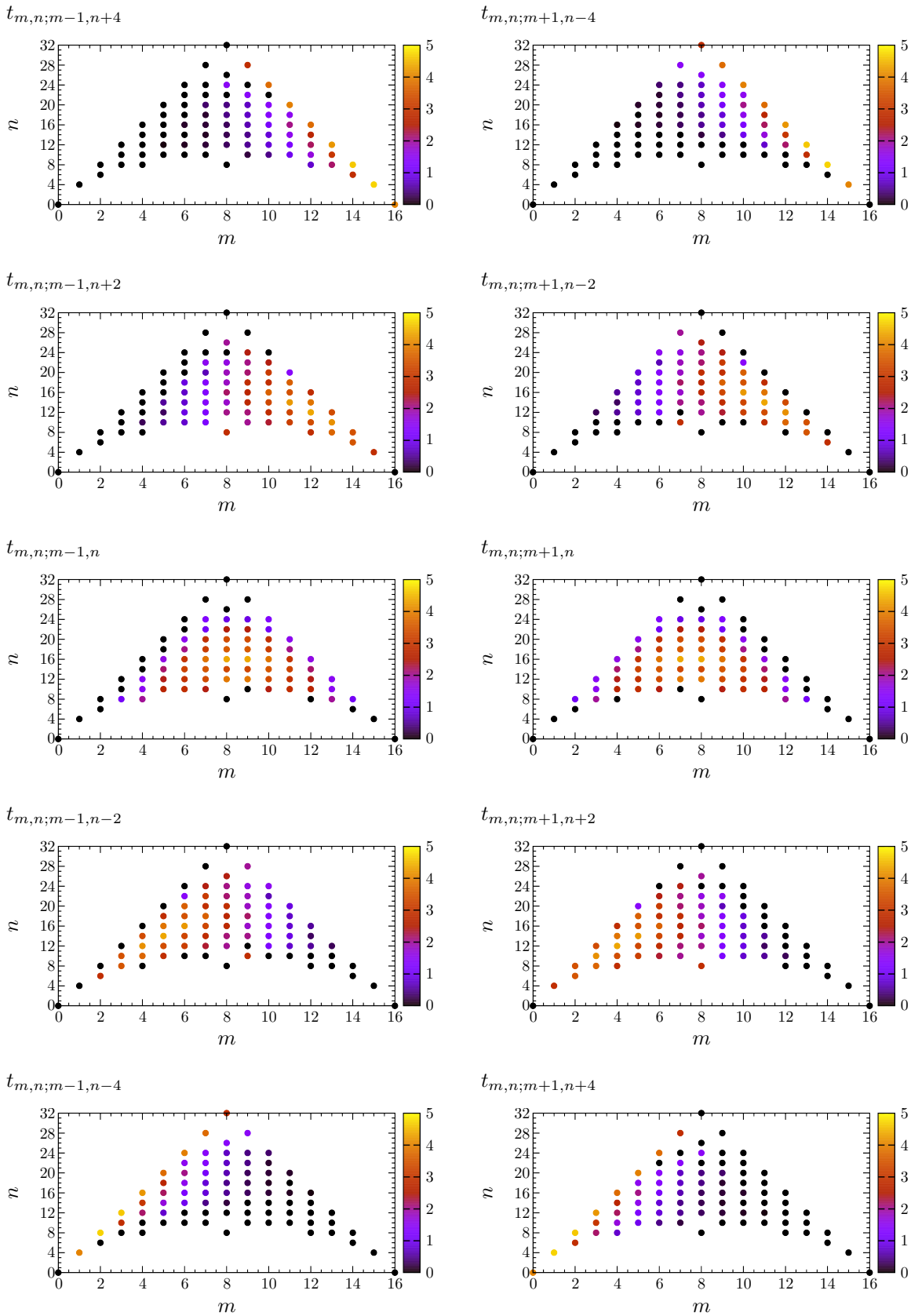


Abbildung E.5: Durch Abzählen bestimmte Werte der $t_{m,n;m',n'}$ für das 4×4 -System.

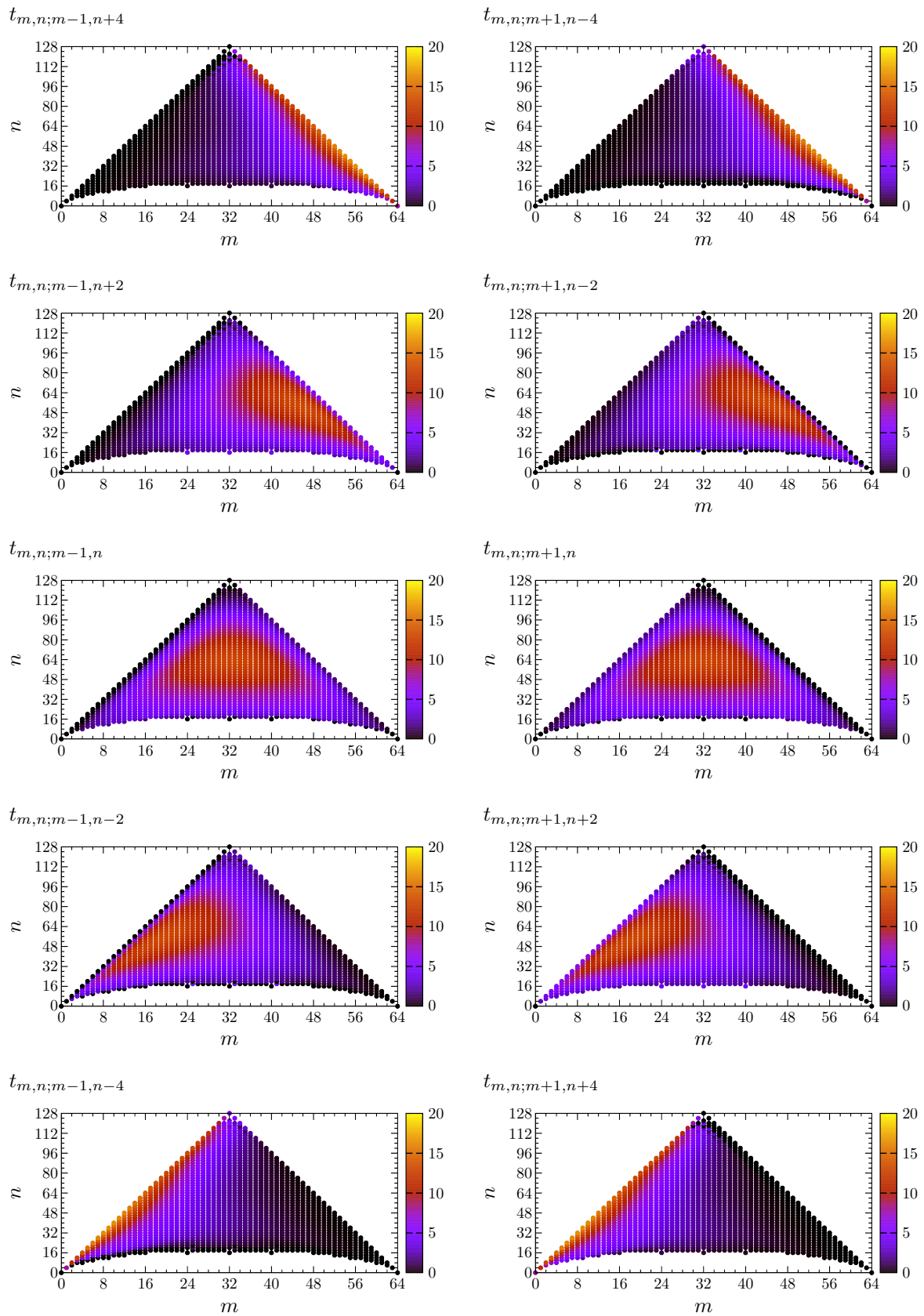


Abbildung E.6: Durch Rare Event Sampling bestimmte Werte von $t_{m,n;m',n'}$ für das 8×8 -System.

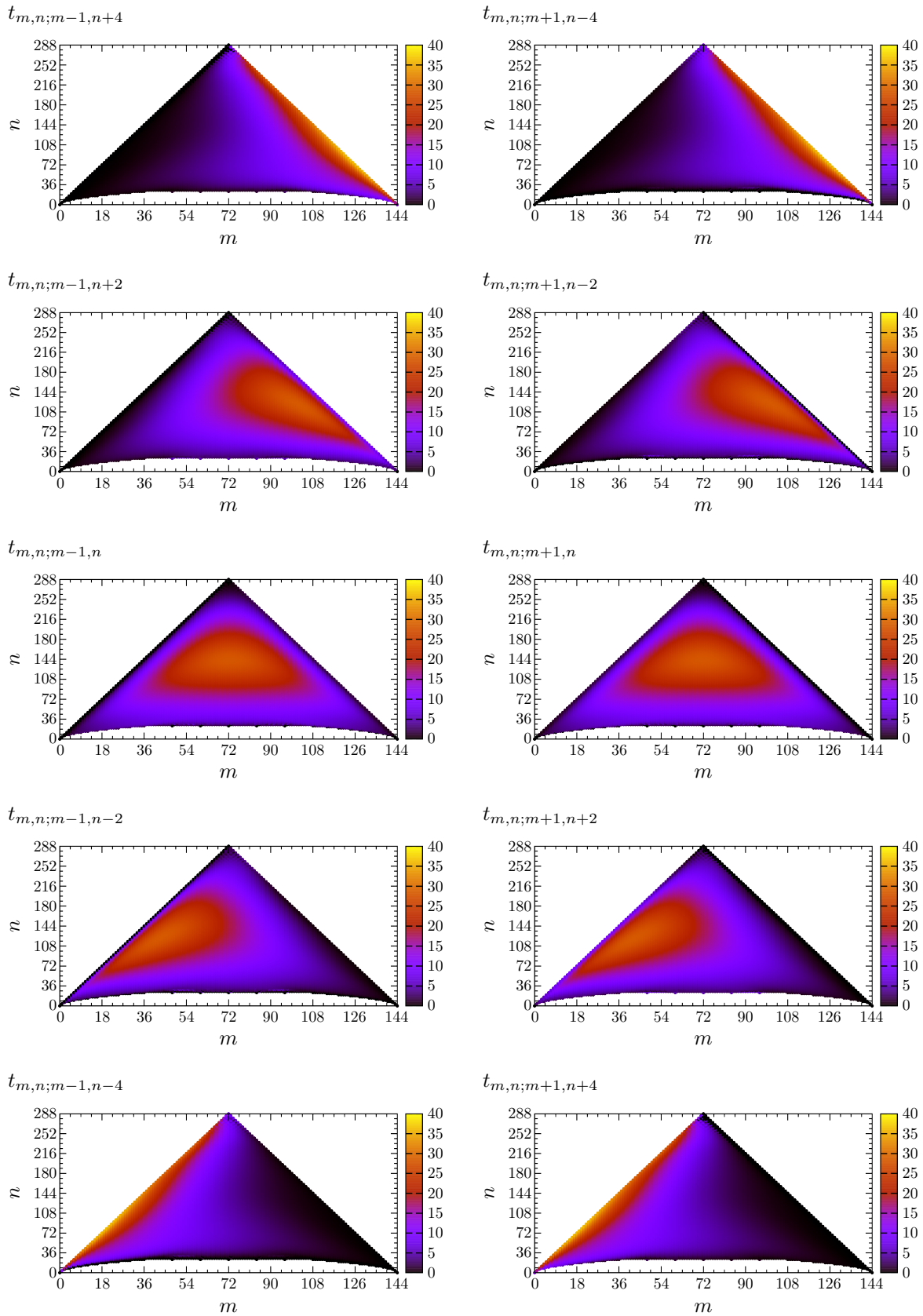


Abbildung E.7: Durch Rare Event Sampling bestimmte Werte von $t_{m,n;m',n'}$ für das 12×12 -System.

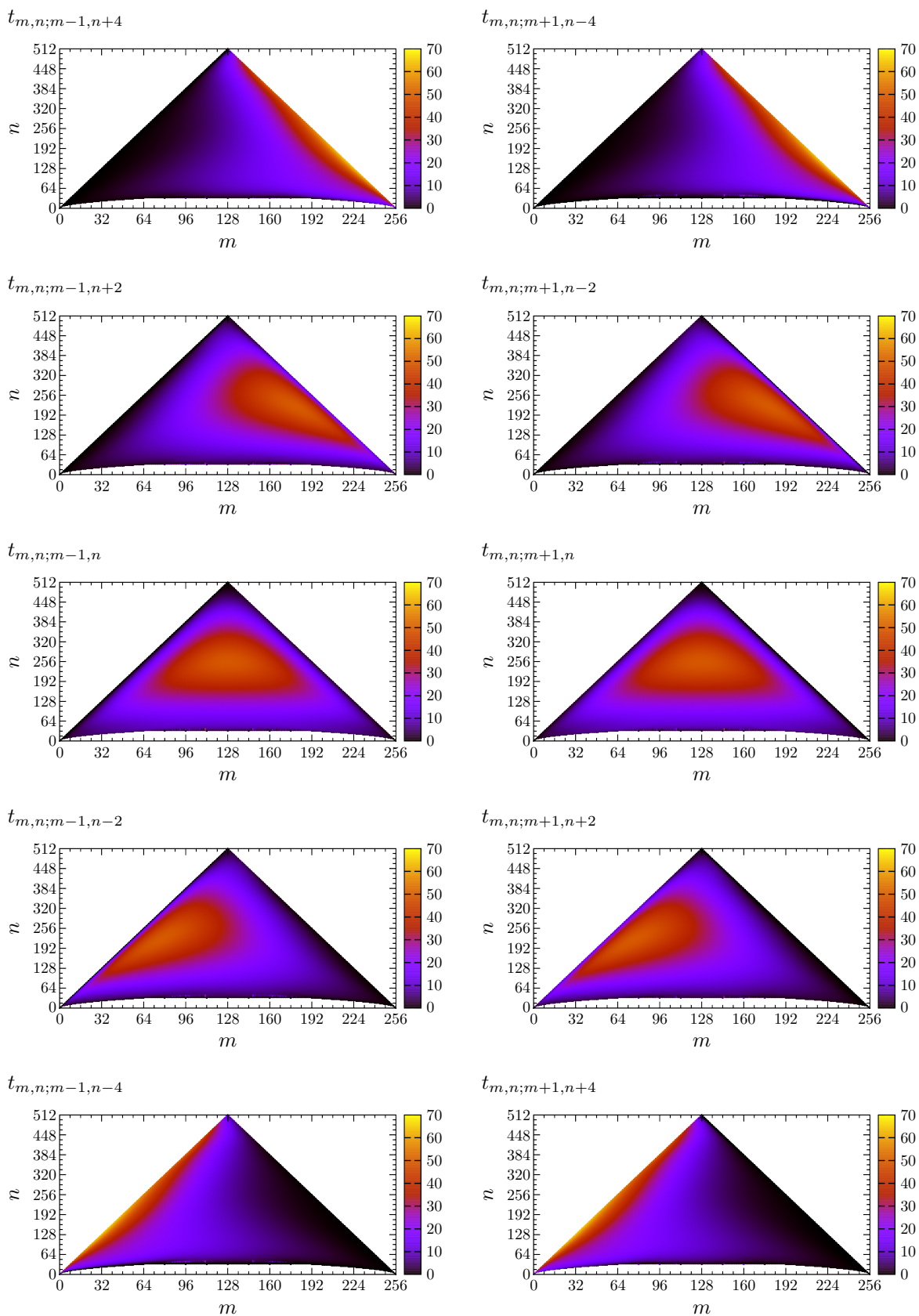


Abbildung E.8: Durch Rare Event Sampling bestimmte Werte von $t_{m,n;m',n'}$ für das 16×16 -System.

Bestimmung der minimalen Kinkzahl

Abschließend sollen noch analytische Ausdrücke für die minimale Kinkzahl $n_{\min}(m)$ zu einer gegebenen Anzahl m an Spin down hergeleitet werden. Im Gegensatz zum Modell in einer Dimension auf der Kette mit periodischen Randbedingungen, für das die minimale Kinkzahl für $0 < m < N$ immer durch 2 gegeben ist, ist die minimale Kinkzahl auf dem zweidimensionalen Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen eine Funktion von m . Dabei gilt es zu beachten, dass für kleine Werte von m eine zusammenhängende, möglichst kompakte Anordnung der Spin down die Kinkzahl minimiert, wohingegen für größere Werte von m die periodischen Randbedingungen berücksichtigt werden müssen, da in diesem Fall durch sukzessives Auffüllen ganzer Reihen die minimale Kinkzahl erreicht wird. Zudem existiert ein Bereich mit Werten von m , für den beide der beschriebenen Anordnungen der Spin down zur minimalen Kinkzahl führen. Werden die Spin down möglichst kompakt angeordnet, so ergeben sich die in der Tabelle in Abbildung E.9 angegebenen Kinkzahlen in Abhängigkeit von m . Bei der möglichst kompakten Anordnung handelt es sich um eine möglichst quadratische Anordnung der Spin down als ein zusammenhängendes Cluster. Dies ist in der Grafik in Abbildung E.9 für verschiedene Werte von m veranschaulicht. Dabei ist jeweils eine mögliche Konfiguration des Clusters dargestellt. Um ausgehend von einem Cluster für ein gegebenes m das Cluster für $m + 1$ zu erhalten, wird entlang der langen Kante des Clusters ein zusätzlicher Spin down angefügt.

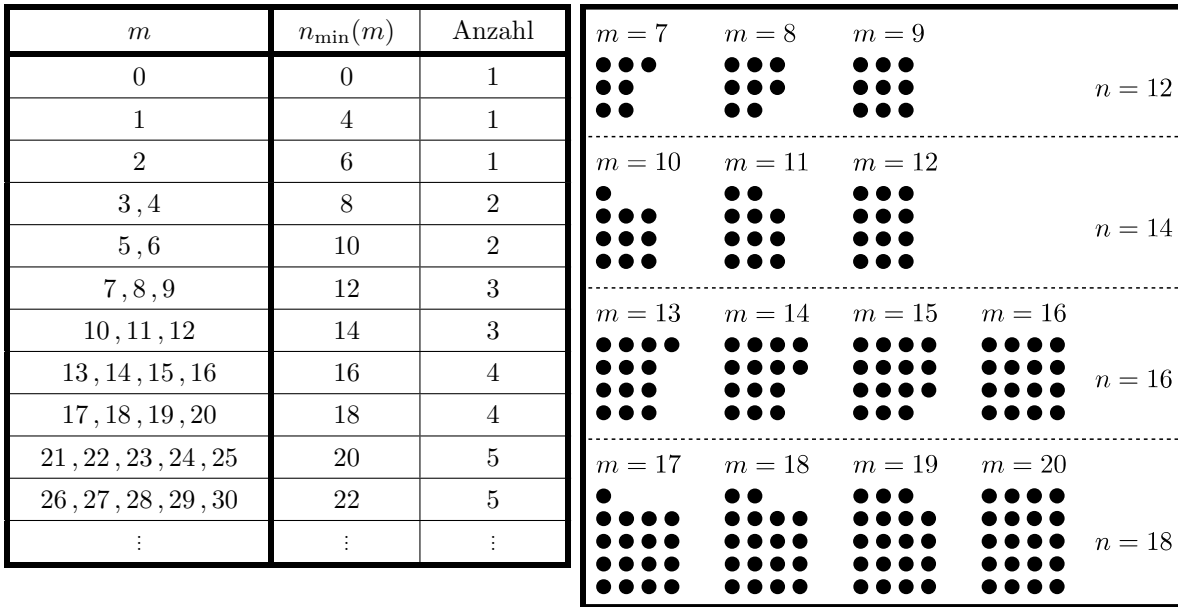


Abbildung E.9: Minimale Kinkzahl zu vorgegebener Anzahl m an Spin down bei Anordnung der Spin down in Form eines möglichst kompakten Clusters. In der Abbildung ist für verschiedene Werte von m beispielhaft eine Konfiguration der Spin down zu der angegebenen Kinkzahl dargestellt. Zudem erklärt die Abbildung das Zustandekommen den gleichen Kinkzahl zu verschiedenen Werten von m . Um ausgehend von einem Cluster für ein gegebenes m das Cluster für $m + 1$ zu erhalten, wird entlang der langen Kante des Clusters ein zusätzlicher Spin down angefügt. Hierdurch ergibt sich eine durch die Länge der längeren Kante bestimmte Anzahl an Werten von m mit gleicher Minimalanzahl an Kinks.

Werden die Reihen des Quadratgitters der Kantenlänge L hingegen sukzessive mit den Spin down aufgefüllt, so ergibt sich für $m \geq L$ eine Kinkzahl von

$$n = \begin{cases} 2L & \text{falls } m \bmod L = 0 \\ 2L + 2 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{E.13})$$

Durch einen Vergleich mit der sich bei möglichst kompakter Anordnung der m Spin down ergebenden minimalen Kinkzahl kann entschieden werden, durch welche Anordnung die Kinkzahl innerhalb des Systems minimiert wird. Ist die minimale Kinkzahl für große Werte von m durch Auffüllen der Reihen innerhalb

des Systems gegeben, so kann der Wert von $N_{m,n}$ einfach angegeben werden. Es ist

$$N_{m,n} = \begin{cases} 2L & \text{falls } m \bmod L = 0 \\ 4N & \text{sonst} \end{cases} . \quad (\text{E.14})$$

Diese Werte ergeben sich durch alle möglichen Anordnungen des Blocks der Spin down innerhalb des Systems. Wird hingegen $n_{\min}(m)$ durch Anordnung der Spin down in Form eines möglichst kompakten Clusters erreicht, so ergibt sich durch Translationen des Clusters für $N_{m,n}$ ein Wert, der ein Vielfaches der Positionen N des Systems darstellt. Der Vorfaktor ist durch Anzahl der verschiedenen Anordnungen der Spins innerhalb des Clusters bestimmt. Im Falle einer quadratischen Form des Clusters beträgt er 1. Für Werte von m , für die die minimale Kinkzahl durch beide Formen der Anordnung der Spin down erreicht werden kann, ergibt sich $N_{m,n}$ als Summe über die Beiträge. In Tabelle E.1 sind die Beiträge zu den $N_{m,n}$ angegeben, die sich aus den in der Tabelle in Abbildung E.9 Werten von m und n ergeben.

m	n	$N_{m,n}$
0	0	1
1	4	N
2	6	$2N$
3	8	$6N$
4	8	N
5	10	$8N$
6	10	$2N$
7	12	$22N$

m	n	$N_{m,n}$
8	12	$6N$
9	12	N
10	14	$30N$
11	14	$8N$
12	14	$2N$
13	16	$68N$
14	16	$22N$
15	16	$6N$

m	n	$N_{m,n}$
16	16	N
17	18	$88N$
18	18	$30N$
19	18	$8N$
20	18	$2N$
21	20	$187N$
22	20	$68N$
23	20	$22N$

m	n	$N_{m,n}$
24	20	$6N$
25	20	N
26	22	$238N$
27	22	$88N$
28	22	$30N$
29	22	$8N$
30	22	$2N$
⋮	⋮	⋮

Tabelle E.1: Sich aus der Anordnung der Spin down zu einem möglichst kompakten Cluster ergebende Beiträge zu $N_{m,n}$ für die in der Tabelle in Abbildung E.9 angegebene Anzahl m an Spin down sowie Kinkzahl n .

Kann die minimale Kinkzahl sowohl durch sukzessives Auffüllen der Reihen des Systems mit den Spin down als auch durch Anordnung der Spin down als möglichst kompaktes Cluster erreicht werden, so sind die Werte für $N_{m,n}$ gemäß Gleichung (E.14) und die aus Tabelle E.1 zu entnehmenden Werte zu addieren. Kenntnis von $N_{m,n}$ für die minimale Kinkzahl zu gegebenem m erlaubt eine weitere Überprüfung der Resultate des Monte-Carlo-Verfahrens zur Bestimmung der $N_{m,n}$ und der $T_{m,n;m',n'}$, da diese Werte für das Verfahren am schwierigsten zu bestimmen sind. Eine gute Übereinstimmung hier ist ein starkes Indiz für eine gute Übereinstimmung auch der anderen Werte.