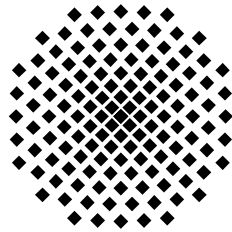


# **Dynamische und thermische Eigenschaften abgeschlossener modularer quantenmechanischer Systeme**

Diplomarbeit von  
**Markus Joachim Henrich**

08. Juli 2004

Hauptberichter : Prof. Günter Mahler  
Mitberichter : Prof. Alejandro Muramatsu



Institut für Theoretische Physik Teil 1  
Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

### **Ehrenwörtliche Erklärung**

Ich erkläre, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Stuttgart, 08. Juli 2004

*Markus Joachim Henrich*

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik</b>	<b>3</b>
2.1. Schrödinger-Dynamik . . . . .	3
2.2. Dichteoperatoren und zusammengesetzte Systeme . . . . .	4
2.2.1. Dichteoperator . . . . .	4
2.2.2. von Neumann Gleichung . . . . .	4
2.2.3. Zusammengesetzte Systeme . . . . .	5
2.2.4. Verschränkung . . . . .	5
2.2.5. von Neumann Entropie . . . . .	6
2.3. Thermisches Verhalten . . . . .	6
2.3.1. Quantenthermodynamik . . . . .	7
2.3.2. Kanonische Bedingungen . . . . .	8
2.3.3. Thermodynamische Temperatur und Spektral-Temperatur	11
<b>3. Thermisches Verhalten von Spinsystemen unter Schrödinger-Dynamik</b>	<b>13</b>
3.1. System und Umgebung . . . . .	13
3.1.1. Spinsystem . . . . .	13
3.1.2. Umgebung . . . . .	13
3.1.3. Wechselwirkung zwischen System und Umgebung . . . . .	14
3.2. Numerische Simulationen . . . . .	15
3.2.1. 1-Spinsystem und Umgebung . . . . .	15
3.2.2. Modulare Systeme . . . . .	18
3.2.3. 2-Spinsystem . . . . .	18
3.2.4. 3-Spinsystem . . . . .	28
<b>4. Temperaturfluktuationen</b>	<b>35</b>
4.1. Berechnung der Fluktuationen . . . . .	35
4.1.1. Ergebnisse . . . . .	37

<b>5. Offene Quanten-Systeme</b>	<b>39</b>
5.1. Einleitung . . . . .	39
5.2. Quanten Mastergleichung . . . . .	39
5.2.1. Herleitung der Mastergleichung . . . . .	39
<b>6. Mastergleichung vs Schrödinger-Dynamik</b>	<b>43</b>
6.1. 2-Spinsystem gekoppelt an ein Bad . . . . .	43
6.1.1. Numerische Ergebnisse . . . . .	45
6.2. Lokale und globale Temperatur . . . . .	46
6.2.1. 2-Spinsystem . . . . .	46
6.2.2. 3-Spinsystem . . . . .	48
<b>7. Systeme jenseits des thermischen Gleichgewichts</b>	<b>51</b>
7.1. Lokale und globale Temperatur . . . . .	51
7.1.1. Spinsystem zwischen zwei Bädern . . . . .	52
7.1.2. Zur Temperaturmessung an einer Spinkette . . . . .	54
<b>8. Zusammenfassung</b>	<b>67</b>
<b>A. Numerische Methoden</b>	<b>69</b>
A.1. Schrödinger-Dynamik . . . . .	69
A.1.1. Erzeugung der Spinsystem Operatoren . . . . .	69
A.1.2. Erzeugung der Umgebungs-Hamilton-Operatoren . . . . .	69
A.1.3. Schrödinger-Dynamik . . . . .	71
A.1.4. Temperaturberechnung . . . . .	71
A.2. Mastergleichung . . . . .	71

# Symbolverzeichnis

$i = \sqrt{-1}$	imaginäre Einheit
$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	Plancksches Wirkungsquantum
$k_B$	Boltzmann-Konstante
$e$	Eulersche Zahl
$\Re(A)$	Realteil der Größe $A$
$\Im(A)$	Imaginärteil der Größe $A$
$[A, B] = AB - BA$	Kommutator der Größen $A$ und $B$
$\otimes$	dyadisches Produkt
$\langle A \rangle_t$	zeitlicher Mittelwert der Größe $A$
$\langle A \rangle$	Erwartungswert der Größe $A$
$(\Delta A)^2$	Varianz der Größe $A$
$\text{Tr } A$	Spur der Matrix $A$
$A^\dagger = (A^*)^T$	hermitesch Konjugierte der Größe $A$
$\dot{A} = \frac{dA}{dt}$	Zeitableitung der Größe $A$
$\mathcal{H}$	Hilbertraum
$\mathcal{D}$	Dissipationsterm
$\mathcal{L}$	Lindbladoperator
$T_{\text{lok}}^n$	lokale Temperatur des $n$ -ten Spins
$\beta_{\text{lok}}^n$	reziproke Temperatur des $n$ -ten Spins
$T_{\text{spec}}$	Spektraltemperatur
$\beta_{\text{spec}}$	reziproke Spektraltemperatur
$\beta_B$	Umgebungstemperatur
$\hat{H}$	Hamiltonoperator
$\hat{I}_{WW}$	zufällige Wechselwirkungsmatrix
$\hat{H}_{WW}; I_G$	Wechselwirkungsoperator
$\lambda$	Maß für die Stärke der internen Wechselwirkung
$\lambda_{SS}$	Maß für die Stärke der Spin-Spin-Wechselwirkung
$\lambda_{TS}$	Maß für die Stärke der Thermo-Spin-Wechselwirkung
$\kappa$	Maß für die Stärke der Wechselwirkung mit der Umgebung
$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$	Pauli-Matrizen

## Symbolverzeichnis

$U$	Energieerwartungswert
$C, D$	Abstandsmaße
$ \Psi\rangle$	Zustandsvektor
$ A, a\rangle$	Eigenzustand des Systems mit Eigenwert $E_a$
$ B, b\rangle$	Eigenzustand der Umgebung mit Eigenwert $E_b$
$\rho$	Dichtematrix
$\rho_S$	reduzierte Dichtematrix des Systems
$W_n$	Eigenwert, Wahrscheinlichkeit
$p(E)$	Energieverteilung
$W_A^d$	dominante Energieverteilung
$n$	Entartungsgrad; Zustandsdichte; Dimension
$N$	Entartungsgrad; Systemgröße
$Z_S$	Zustandssumme
$P$	Purity
$S$	Entropie
$\lambda_E$	Lagrange-Multiplikatoren
$t$	Zeit
$A$	Fläche
$E$	Energie
$\{W_{AB}\}$	Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung
$\omega$	Frequenz

# 1. Einleitung

Die statistische Thermodynamik ist seit ihrer Einführung durch Boltzmann [1] ein sehr fruchtbares Gebiet. Mittels der Verwendung von Ratengleichungen und des H-Theorems war es möglich, von wenigen mikroskopischen Eigenschaften auf das makroskopische Verhalten zu schließen. Die reversiblen Gleichungen der Newtonschen Mechanik schienen so auch irreversible Vorgänge beschreiben zu können.

Die statistische Deutung wurde jedoch nicht von Beginn an akzeptiert. Erst durch die Ensemble-Theorie und die damit verbundene Ergodenhypothese von Gibbs [2] gelangte sie zu allgemeiner Anerkennung. Die Emergenz thermodynamischer Eigenschaften konnte aber bis heute nur mit mehr oder minder plausiblen Zusatzannahmen erreicht werden.

Einen neuen rein quantenmechanischen Zugang lieferte J. Gemmer in seiner Doktorarbeit [3]. Er zeigte, dass die Schrödinger-Gleichung für zusammengesetzte Systeme schon thermodynamisches Verhalten in sich trägt. Das System ist ein abgeschlossenes System, welches unterteilt wird in eine Umgebung und ein kleines System (“bipartide system“). Irreversibilität erscheint bei genügend großen Umgebungen ohne Zuhilfenahme der Ergodenhypothese.

Diese Theorie, auch Quantenthermodynamik genannt, macht keine Aussagen über die Struktur des kleinen Systems. Gegenstand dieser Arbeit ist es, zu untersuchen, ob die Theorie auch für strukturierte, sprich modular aufgebaute Systeme gültig ist. Analysiert wird, in wie weit die innere Struktur Auswirkungen auf das thermische Verhalten hat. Es ist nicht selbstverständlich, dass z. B. die Dynamik einer Spinkette, die nur über einen Spin mit der Umgebung verbunden ist, in Einklang mit der Theorie steht.

Kapitel 2 skizziert nach einer kurzen Einführung in die verwendeten quantenmechanischen Grundlagen und Begriffe, wie thermodynamisches Verhalten in Einklang mit der Schrödinger-Gleichung gebracht werden kann. Kapitel 3 liefert dazu für ein einfaches System numerische Ergebnisse. Aufbauend darauf werden einfache modulare Systeme wie Spinketten betrachtet. Für diese

## 1. Einleitung

modularen Systeme wird das Relaxationsverhalten unter Schrödinger-Dynamik analysiert. Im Mittelpunkt der Untersuchung stehen globale und lokale thermische Eigenschaften der Spinketten. Abschließend werden in Kapitel 4 thermodynamische Fluktuationen dieser Spin-Ketten betrachtet.

Neue Ideen und Ansätze wollen aber auch immer gut überprüft und mit bereits verwendeten Ansätzen verglichen werden. Deshalb werden die Ergebnisse, die die Quantenthermodynamik liefert, verglichen mit dem allgemein anerkannten Ansatz einer Mastergleichung. Ein wesentlicher Unterschied zur Quantenthermodynamik besteht darin, dass die Mastergleichung im Gegensatz zum Ansatz von J. Gemmer von einem offenen System ausgeht. Kapitel 5 zeigt kurz die Herleitung einer Mastergleichung für offene Systeme. Kapitel 6 vergleicht dann das asymptotische thermische Verhalten von Spinketten unter Schrödinger-Dynamik aus Kapitel 3 mit dem Ergebnis der Mastergleichung.

Eine wichtige Größe, die zur Analyse von globalen und lokalen Eigenschaft in dieser Arbeit verwendet wird, ist die Temperatur. Als täglich wahrzunehmende Größe, war sie auch Ausgangspunkt der phänomenologischen Thermodynamik. Auf der Makroskala wie im täglichen Leben ist es relativ einfach, die Temperatur eines Gegenstandes zu bestimmen. Anders verhält es sich auf mikroskopischer Ebene. Dort stellt sich die Frage, wie lokal die Temperatur noch bestimmt werden kann. Ist es möglich, an einem Draht mit einer bestimmten Temperatur diese auch noch an wenigen Drahtatomen zu messen? Theoretische Überlegungen von M. Hartmann (vgl. [4]) zu diesem Problemkreis werden durch numerische Simulationen von Spinketten in Kapitel 7 analysiert.



## 2. Thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik

In diesem Kapitel wird dargestellt, wie aus der Schrödinger-Gleichung für ein zusammengesetztes System thermodynamisches Verhalten emergieren kann. Diese Herleitung und Idee geht auf J. Gemmer zurück und ist ausführlich beschrieben in [5]. Zunächst werden die wichtigsten theoretischen Grundlagen und Begriffe erörtert, welche zum Verständnis notwendig sind.

### 2.1. Schrödinger-Dynamik

Der Ausgangspunkt der Untersuchungen in den Kapiteln 2 - 4 ist die Schrödinger-Gleichung. Für ein System definiert durch den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  lautet sie

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

$|\psi(t)\rangle$  ist der Zustand des Systems zur Zeit  $t$ . Ist der Hamilton-Operator zeitunabhängig, spricht man von einem konservativen System, bei dem die Energie erhalten bleibt. Die formale Lösung von 2.1 mit zeitunabhängigem Hamilton-Operator lautet

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} |\psi(t_0)\rangle \quad (2.2)$$

Für Systeme dieser Art bleibt die Energieverteilung unter der Schrödinger-Dynamik erhalten. Dadurch gilt für den Projektionsoperator  $\hat{P}$  auf die Energie-Eigenzustände die Beziehung

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (2.3)$$

Der Energie-Erwartungswert  $\langle P \rangle$  bleibt somit konstant, weshalb für einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  in der Energie-Eigenbasis  $|n\rangle$

$$\langle n | \langle n | \rangle = \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = |c_n|^2 \quad (2.4)$$

gilt. Die Wahrscheinlichkeiten  $|c_n|^2$  bleiben konstant.

## 2.2. Dichteoperatoren und zusammengesetzte Systeme

### 2.2.1. Dichteoperator

Die allgemeinste Beschreibung eines quantenmechanischen Zustandes geschieht mittels eines Dichteoperators  $\rho$ . Dichteoperatoren müssen folgende Bedingungen erfüllen (vgl. z. B. [6]):

$$\text{Tr } \rho = 1 \quad (2.5)$$

$$\rho = \rho^\dagger \quad (2.6)$$

$$\text{Tr } \rho^2 \leq 1 \quad (2.7)$$

Gilt in Gleichung 2.7 das Gleichheitszeichen, handelt es sich um einen reinen Zustand, im anderen Fall um einen gemischten. Die Spektraldarstellung eines gemischten Zustands  $\rho$  für ein diskretes Spektrum lautet

$$\rho = \sum_n W_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (2.8)$$

$W_n$  sind die Eigenwerte von  $\rho$ . Für diese gilt

$$\sum_n W_n = 1 \quad (2.9)$$

$$W_n = W_n^* \quad (2.10)$$

$$W_n \geq 0. \quad (2.11)$$

### 2.2.2. von Neumann Gleichung

Ausgehend von der Schrödinger-Gleichung 2.1 erhält man die von Neumann Gleichung [7]

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)]. \quad (2.12)$$

Sie beschreibt die Dynamik der Dichtematrix eines Systems und wird auch als Ausgangspunkt für die Mastergleichung verwendet.

### 2.2.3. Zusammengesetzte Systeme

Der gesamte Hilbertraum  $\mathcal{H}$  eines Systems, welches aus z. B. zwei Teilen besteht, wird durch das Tensorprodukt der beiden Teilräume beschrieben

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (2.13)$$

(siehe [7]). Die Dichtematrix  $\rho(t)$  zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  setzt sich zusammen aus den beiden Dichtematrizen  $\rho_1(t_0)$  und  $\rho_2(t_0)$  der jeweiligen Teilsysteme in der Form

$$\rho(t_0) = \rho_1(t_0) \otimes \rho_2(t_0). \quad (2.14)$$

Durch die zeitliche Entwicklung des Gesamtsystems (vgl. Gleichung 2.12) ist es bei miteinander wechselwirkenden Teilsystemen nicht mehr möglich, den Gesamtzustand  $\rho(t)$  zu einem späteren Zeitpunkt als Produktzustand der Form 2.14 darzustellen (vgl. [8]). Interessiert man sich nur für den Teilraum  $\mathcal{H}_1$ , so ist es trotzdem möglich zu einem beliebigen Zeitpunkt die reduzierte Dynamik durch Ausspuren von System (2)

$$\rho_1(t) = \text{Tr}_2 \rho(t) \quad (2.15)$$

zu erhalten. Wechselwirken beide Teilsysteme miteinander, entstehen Korrelationen zwischen beiden Systemen. Das Ausspuren eines Teilsystems verursacht einen Informationsverlust über diese Korrelationen (z. B. Verschränkungen, siehe nächster Abschnitt, vgl. [6]).

### 2.2.4. Verschränkung

Verschränkung oder Entanglement ist ein rein quantenmechanisches Phänomen. Das Paradebeispiel für ein Zustand mit maximaler Verschränkung ist ein EPR-Zustand [9] der Form

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \otimes |0\rangle - |0\rangle \otimes |1\rangle). \quad (2.16)$$

Gleichung 2.16 beschreibt zwei wechselwirkende Spins mit  $|0\rangle$  für “spin-down“ und  $|1\rangle$  für “spin-up“. Für zusammengesetzte Systeme, in welchen die Subsysteme untereinander wechselwirken, verschränken diese je nach Wechselwirkungsstärke miteinander. Verschränkungen treten auch zwischen kleinen Systemen wie Spins und ihrer Umgebung auf [10]. Dieser Effekt, mag er auch klein sein, ist für die nachfolgende Betrachtung wichtig.

### 2.2.5. von Neumann Entropie

Die von Neumann Entropie  $S$  ist definiert durch

$$S(\rho) = -k_B \operatorname{Tr} \rho \ln \rho. \quad (2.17)$$

$k_B$  ist der Boltzmann-Faktor. Die Entropie ist ein Maß für die Reinheit des Zustandes  $\rho$ . Für einen reinen Zustand gilt

$$\operatorname{Tr} \rho^2 = 1 \quad (2.18)$$

und für einen gemischten Zustand

$$\operatorname{Tr} \rho^2 < 1. \quad (2.19)$$

Die von Neumann Entropie nimmt für einen reinen Zustand den Wert 0 und für einen maximal gemischten Zustand den Wert

$$S(\rho) = k_B \ln N \quad (2.20)$$

an. Unter einer unitären Transformation, wie z. B. dem Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U} = e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}}$  (vgl. Gleichung 2.2), gilt

$$S(\hat{U} \rho \hat{U}^\dagger) = S(\rho). \quad (2.21)$$

Die von Neumann Entropie bleibt somit erhalten. Für zusammengesetzte Systeme hat die von Neumann Entropie die Eigenschaft [11]

$$S(\rho) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2). \quad (2.22)$$

Gleichheit gilt, wenn die Teilsysteme unkorreliert sind. Die Ungleichung 2.22 drückt den bereits angesprochenen Informationsverlust für verschränkte Systeme aus. Wird ein Teilsystem ausgespurt, gehen Informationen über Korrelationen verloren und die lokale Entropie erhöht sich. Unter einer zeitlichen Entwicklung kann sich somit die lokale von Neumann Entropie der jeweiligen Teilsysteme ändern.

## 2.3. Thermisches Verhalten

Die statistische Thermodynamik macht Aussagen über ein makroskopisches System, wobei die zugrundeliegende mikroskopische Struktur berücksichtigt wird. Um Aussagen über die Entropie eines Systems zu machen, wird die Hamiltonsche Mechanik der mikroskopischen Struktur im Phasenraum des Systems untersucht. Durch das H-Theorem oder der (quasi-) Ergodenhypothese wird die Hamiltonsche Mechanik im Phasenraum eingeschränkt, wodurch das Auftreten von Irreversibilität erklärt werden kann (vgl. [12]).

### 2.3.1. Quantenthermodynamik<sup>1</sup>

Mikroskopische Systeme wie Atome sind quantenmechanische Systeme, deren Dynamik im nichtrelativistischen Fall durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben wird. Deshalb ist die Schrödinger-Dynamik als Ausgangspunkt der Thermodynamik eine geeignete Wahl. Die vorgestellte Herleitung orientiert sich an der Arbeit von J. Gemmer [3]. (Ähnliche Betrachtungen, jedoch eingeschränkter, sind auch in [13] zu finden.)

Um einen quantenmechanischen Zugang zur Thermodynamik zu erhalten, geht man ähnlich wie in der klassischen Theorie vor. An Stelle des Phasenraums wird die Struktur des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  bezüglich der Schrödinger-Dynamik untersucht. Dazu werden folgende Annahmen gemacht:

- Unterteilbarkeit des Gesamtsystems in zwei Subsysteme (“bipartite system“). Ein kleines quantenmechanisches System (“System S“) (z. B. ein Spin), welches an ein größeres quantenmechanisches System (“Umgebung U“) gekoppelt ist.
- Schwache Kopplung des Systems an die Umgebung (siehe Gleichung 2.24).

Der Gesamt-Hamilton-Operator  $\hat{H}_{ges}$  lautet

$$\hat{H}_{ges} = \hat{H}_S + \hat{H}_U + \hat{H}_{WW} \quad (2.23)$$

mit der Wechselwirkung  $\hat{H}_{WW}$

$$\langle \hat{H}_{WW} \rangle \ll \langle \hat{H}_S \rangle, \langle \hat{H}_U \rangle, \quad (2.24)$$

$\hat{H}_S$  ist der Hamilton-Operator des Systems,  $\hat{H}_U$  der der Umgebung und  $H_{WW}$  ist der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator.

Betrachtet man die Entropie des Gesamtsystems, ändert sie sich unter Schrödinger-Dynamik nicht und es gilt  $S(\rho_{ges}) = 0$ . Für das reduzierte System S (z. B. Spin) gilt dies jedoch nicht. Aufgrund von Verschänkungen mit der Umgebung erhöht sich die Entropie. Thermisches Verhalten unter Schrödinger-Dynamik stellt sich ein, wenn sich das System nur in Regionen des Hilbertraums mit maximaler Entropie aufhält. Dazu muss diese Region des Hilbertraums am größten sein und fast den gesamten Hilbertraum ausfüllen. Dadurch ist gesichert, dass die Wahrscheinlichkeit, das System in dieser Region anzutreffen, nahe bei 1 liegt. Der Zustand des Gesamtsystems wird in Form von

$$|\psi\rangle = \sum_{A,B} \sum_{a,b} \psi_{ab}^{AB} |A, a\rangle \otimes |B, b\rangle \quad (2.25)$$

---

<sup>1</sup>Eine ausführliche Abhandlung ist in [5] zu finden

## 2. Thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik

dargestellt.  $|A, a\rangle$  ist der  $a$ -te Eigenzustand zum Eigenwert  $E_a$  des kleinen Systems (Entartung  $a = 1, 2, \dots, N_A^S$ ) und  $|B, b\rangle$  ist der  $b$ -te Eigenzustand zum Eigenwert  $E_b$  der Umgebung (Entartung  $b = 1, 2, \dots, N_B^U$ ). Durch Ausspüren der Umgebung ist es möglich, die reduzierte Dichtematrix des Systems

$$\rho^S := \sum_{A, A', B} \sum_{a, a', b} \psi_{ab}^{AB} \left( \psi_{a'b}^{A'B} \right)^* |A, a\rangle \langle A', b'| \quad (2.26)$$

und seine Purity

$$P^S = \sum_{ABCD} \sum_{abcd} \psi_{ab}^{AB} \left( \psi_{cb}^{CB} \right)^* \psi_{cd}^{CD} \left( \psi_{ad}^{AD} \right)^* \quad (2.27)$$

zu erhalten.  $a, A, c, C$  kennzeichnet das System,  $b, B, d, D$  die Umgebung.

### 2.3.2. Kanonische Bedingungen

Wird ein System so an eine Umgebung gekoppelt, dass Energieaustausch möglich ist, spricht man von einer kanonischen Kopplung, bzw. kanonischen Bedingungen. Als Einschränkung im hier gewählten Zugang ist die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit  $W_E$ , dass das Gesamtsystem die Energie  $E$  hat,

$$W_E := \sum_{A, B/E} W_{AB} = \sum_{A, B/E} \sum_{a, b} |\psi_{ab}^{AB}|^2 \quad (2.28)$$

wichtig. Dies folgt aus der Schrödinger-Gleichung (vgl. Gleichung 2.4).  $\psi_{ab}^{AB}$  sind die Entwicklungskoeffizienten des Zustands des Gesamtsystems.  $A, B/E$  bedeutet, alle Zustände  $A$  und  $B$ , für die  $E_A + E_B = E$  gilt.  $W_{AB}$  ist die Besetzungswahrscheinlichkeit des Unterraums mit

$$W_{AB} = W_A^S \cdot W_B^U. \quad (2.29)$$

Alle Zustände, die zur Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\{W_{AB}\}$  gehören, liegen in einem Gebiet des Hilbertraums  $\mathcal{H}$ , dessen Volumen durch

$$A(\{W_{AB}\}) := \prod_{AB} \int \det \mathcal{F}^{AB} \prod_n d\phi_n^{AB} \quad (2.30)$$

gegeben ist. In 2.30 ist  $\phi_n$  eine Parametrisierung des Gebiets und  $\mathcal{F}$  die dazugehörige Funktionaldeterminante. Die Integrale in 2.30 beschreiben Oberflächen von Hypersphären mit dem Radius  $W_{AB}$ , so dass (vgl. [14])

$$A(\{W_{AB}\}) := \prod_{AB} W_{AB}^{N_{AB} - \frac{1}{2}} O(N_{AB}). \quad (2.31)$$

Der Entartungsgrad des betreffenden Unterraums mit

$$N_{AB} = N_A^S \cdot N_B^U \quad (2.32)$$

ist die Dimension des betreffenden Unterraums.  $O(N_{AB})$  ist die Oberfläche einer  $2N_{AB}$ -dimensionalen Hypersphäre mit Radius  $R = 1$ . Zu bestimmen ist, für welche Verteilung  $\{W_{AB}\}$  die Fläche  $A(\{W_{AB}\})$  maximal ist. Zur Maximierung wird  $\ln A$  anstelle von  $A$  verwendet. Dies ist aufgrund der Monotonie der Logarithmusfunktion gleichwertig. Wichtig sind nur Terme, die von  $\{W_{AB}\}$  abhängen, weshalb  $O(N_{AB})$  vernachlässigt werden kann. Gesucht ist also die Verteilung  $\{W_{AB}\}$ , für die

$$\ln A' = \sum_{AB} N_{AB} \ln W_{AB} \quad (2.33)$$

maximal wird. Dabei wurde die Näherung  $N_{AB} - \frac{1}{2} \approx N_{AB}$  benutzt, was für große Hilberträume und somit großen Dimensionen  $N_{AB}$  zulässig ist. Die Methode der Lagrange-Multiplikatoren mit der Nebenbedingung

$$\sum_E \lambda_E \left( \sum_{A,B/E} W_{AB} - W_E \right) = 0 \quad (2.34)$$

liefert dann den zu maximierenden Ausdruck

$$\ln \tilde{A} = \sum_{AB} N_{AB} \ln W_{AB} - \sum_E \lambda_E \left( \sum_{A,B/E} W_{AB} - W_E \right). \quad (2.35)$$

Der Extremwert von 2.35 wird durch

$$\frac{\partial \ln \tilde{A}}{\partial W_{AB}} = 0 \quad (2.36)$$

bestimmt. Man erhält daraus für die Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\{W_{AB}\}$ , für die  $A$  maximal wird

$$W_{AB}^d = \frac{N_{AB}}{\lambda_{E=E_A+E_B}}. \quad (2.37)$$

Die Lagrange-Multiplikatoren  $\lambda_E$  lauten mit 2.28

$$\lambda_E = \frac{N_E}{W_E} \quad (2.38)$$

## 2. Thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik

wobei für die Entartungszahl  $N_E$

$$N_E = \sum_{A,B/E} N_{AB}. \quad (2.39)$$

gilt. Die Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\{W_{AB}^d\}$  legt die Region des zugänglichen Hilbertraumes fest, in dem sich die meisten Zustände befinden. Wird durch  $\{W_{AB}^d\}$  ein Gebiet festgelegt, welches fast den gesamten zugänglichen Hilbertraum ausfüllt, ist gesichert, dass sich das System nahezu ausschließlich in dieser Region aufhält. Dies ist erfüllt, wenn alle anderen Verteilungen  $\{W_{AB}\}$  zusammen ein sehr viel kleineres Gebiet im Hilbertraum als  $\{W_{AB}^d\}$  festlegen. Es kann gezeigt werden, dass  $\{W_{AB}^d\}$  dann ein extrem großes Gebiet im Vergleich zu allen anderen  $\{W_{AB}\}$  festlegt, wenn die Entartung  $N_E$  sehr groß ist (vgl. [14] 4.2).

Um Aussagen über das kleine System zu treffen, wird die dominante Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $W_A^d$  des Systems bestimmt. Die irrelevanten Umgebungsanteile von Gleichung 2.37 werden „aussummiert“ und man erhält

$$W_A^d = \sum_B W_{AB}^d = \sum_B \frac{N_{AB}}{\lambda_E} = N_A^S \sum_B \frac{N_B^U W_{E/A,B}}{N_{E/A,B}} \quad (2.40)$$

Ersetzt man  $W_A^d =: W^d(E_A^S)$ ,  $W_E =: W(E)$ ,  $N_A^S =: N^S(E_A^S)$ ,  $N_B^U =: N^U(E_B^U)$  und  $N_E =: N(E)$ , summiert anschließend nicht mehr über die  $B$ 's der Umgebung, sondern über die Energie  $E$ , so wird aus 2.40

$$W^d(E_A^S) = N^S(E_A^S) \sum_E \frac{N^S(E - E_A^S) W(E)}{N(E)}. \quad (2.41)$$

Ist die Gesamtenergie des Systems zu Beginn scharf ( $W(E) = \delta(E - U)$ ) und werden anstelle der Entartungsgrade  $N_A^S$  die Zustandsdichten  $n^S(E^S)$  betrachtet, erhält man aus Gleichung 2.40 schließlich die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$W^d(E^S) = \frac{n^U(U - E^S) n^S(E^S)}{n(U)}. \quad (2.42)$$

Solche Energieverteilungen liefert auch die herkömmliche Thermostatistik unter Verwendung der Ergodenhypothese (vgl. [12] Kap. 2.6). Zu beachten ist, dass Gleichung 2.40, bzw. 2.41 eine Energie-Wahrscheinlichkeitsverteilung  $W_A^d$  definiert, welche nicht unabhängig vom Anfangszustand ist. Wird die Entartungsstruktur  $N^U(E_B^U)$  der Umgebung so gewählt, dass sie exponentiell ansteigt

$$N^U(E_B^U) = N_0^U e^{\alpha E_B^U} \quad N_0^U \in \mathbb{N}^+, \quad (2.43)$$



wird Gleichung 2.41 zu

$$W^d(E_A^S) = N^S(E_A^S) \cdot e^{-\alpha E_A^S} \sum_E \frac{N_0^S e^{\alpha E}}{N(E)}. \quad (2.44)$$

Die Summe hängt nicht von  $E_A^S$  ab, kann also als Normierungsfaktor aufgefasst werden. Für die Dichtematrix des angekoppelten Systems  $S$  gilt somit mit  $\beta = \alpha$  (siehe z. B. [12])

$$\rho_s = \frac{1}{Z_S} e^{-\beta \hat{H}_S}, \quad (2.45)$$

mit der Zustandsumme  $Z_S$

$$Z_S = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_S}. \quad (2.46)$$

Typischerweise ist die Umgebung ein modulares System. In diesem Fall ist  $\alpha$  schwach abhängig von  $E_B^U$  mit  $\alpha \rightarrow \infty$  für  $E_B^U \rightarrow E_{B(min)}^U$ . Gleichung 2.45 und 2.46 gilt dann näherungsweise nur in begrenzten Energiebereichen.

### 2.3.3. Thermodynamische Temperatur und Spektral-Temperatur

Die Temperatur  $T$  wird in der Thermodynamik über die Entropie  $S(U)$ , mit dem Energieerwartungswert  $U$  und der Boltzmann-Konstante  $k_B$ , wie folgt definiert:

$$\beta = \frac{1}{k_B \cdot T} = \frac{\partial S(U)}{\partial U}. \quad (2.47)$$

Sie ist nur für Gleichgewichtssituation definiert und eine intrinsische Größe. Durch Einsetzen der Entropie  $S(U) = k_B \ln N(U)$  wird aus Gleichung 2.47

$$\beta = \frac{\partial}{\partial U} \ln N^U(U). \quad (2.48)$$

Es ist möglich, eine ‘‘Spektral-Temperatur‘‘

$$\beta_{\text{spec}} := \sum_n \frac{W_n}{1 - W_0} \cdot b_n = \frac{1}{k_B \cdot T_{\text{spec}}} \quad (2.49)$$

mit den Spektraltemperaturkomponenten  $b_n$

$$b_n := \frac{\ln(W_n - W_0)}{E_n - E_0} \quad (2.50)$$

## 2. Thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik

zu definieren. Dabei ist  $W_n$  die Wahrscheinlichkeit, das System bei der Energie  $n$  (Entartungsgrad  $N_n$ ) anzutreffen.  $W_0$  ist die Wahrscheinlichkeit, das System im Grundzustand mit der Energie  $E_0$  anzutreffen. Der Vorfaktor ist eine Normierungskonstante. Jeder Term definiert über die relative Besetzung des Niveaus  $n$  bzgl. des Grundzustandes  $n = 0$  eine reziproke Temperatur über welche gewichtet wird. Im Gleichgewicht stimmt die spektrale Temperatur mit der thermodynamischen überein. Diese Definition der Temperatur ist für isolierte Systeme zeitunabhängig. Sie ist auch für Nichtgleichgewichtszustände anwendbar, erfüllt dann aber nicht die geforderten thermodynamischen Eigenschaften. Für ein 2-Niveau-System reduziert sich Gleichung 2.49 zu

$$\frac{W_1}{W_0} = e^{-\beta\Delta E} \quad (2.51)$$

mit  $\Delta E = E_1 - E_0$  und der Normierung der Gesamtwahrscheinlichkeit  $W_1 + W_0 = 1$ .

# 3. Thermisches Verhalten von Spinsystemen unter Schrödinger-Dynamik

In diesem Kapitel werden einfache Systeme auf ihre thermischen Eigenschaften, wie in Kapitel 2 beschrieben, untersucht. Dabei wird immer von einem zweigeteilten Gesamtsystem ausgegangen, einem kleinen Spinsystem und einer großen quantenmechanischen Umgebung. Spin-Subsysteme bieten den Vorteil, dass sie als 2-Niveau-Systeme (minimale Niveau-Zahl) kleine Hilberträume besitzen, was den Rechenaufwand begrenzt.

## 3.1. System und Umgebung

### 3.1.1. Spinsystem

Die hier betrachteten Spinsysteme sind durch ein Magnetfeld in Z-Richtung aufgespalten und der jeweilige lokale Spin-Hamilton-Operator hat die Form

$$\hat{H}_S = \frac{\Delta E}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (3.1)$$

### 3.1.2. Umgebung

Die quantenmechanische Umgebung besteht aus einem dem Spinsystem angepaßtem Mehr-Niveau-System mit exponentiell von der Energie abhängender Entartungsstruktur (siehe Gleichung 2.43). Wichtig ist, dass bei schwacher Wechselwirkung Energieaustausch zwischen dem Spinsystem und der Umgebung ermöglicht wird. Aus diesem Grund sind die Energieabstände in der Umgebung denen des Spinsystems so angepasst, dass in letzterem Energieübergänge möglich sind (siehe auch Anhang A.1.2). Ein typischer Umgebungsoperator



mittelt, unter Berücksichtigung der Hermitezität.

$$P_{\Re(I_{WW}^{ij})}(\Re(I_{WW}^{ij})) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\Re(I_{WW}^{ij})}{4}} \quad (3.5)$$

$$P_{\Im(I_{WW}^{ij})}(\Im(I_{WW}^{ij})) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\Im(I_{WW}^{ij})}{4}} \quad (3.6)$$

Als Maß für die Kopplungsstärke wird der Parameter  $\kappa$  für die System-Umgebungs-Wechselwirkung verwendet. Dazu wird

$$I := \frac{1}{n} \sqrt{\text{Tr} \hat{I}_{WW}^2} \quad (3.7)$$

berechnet.  $I$  ist der Mittelwert der Wechselwirkungsmatrixelemente  $\hat{I}_{WW}$  und  $n$  die Dimension der Wechselwirkungsmatrix. Der verwendete Wechselwirkungsoperator lautet somit

$$\hat{H}'_{WW} = \frac{\hat{I}}{I} \quad \text{oder} \quad \hat{H}_{WW} = \kappa \hat{H}'_{WW}. \quad (3.8)$$

Durch geeignete Wahl von  $\kappa$  ist es möglich, die Wechselwirkung zu variieren.

## 3.2. Numerische Simulationen

Alle folgenden numerischen Simulationen wurden mit Hilfe von C/C++-Programmen durchgeführt. Simuliert wurde immer die exakte Schrödinger-Dynamik des Gesamtsystems. Dazu wurde der Gesamt-Hamilton-Operator diagonalisiert und die Lösung mit Gleichung 2.2 berechnet. Details zur Vorgehensweise und Berechnung der Lösung sind im Appendix beschrieben.

### 3.2.1. 1-Spinsystem und Umgebung

Die Aussagen von Kapitel 2 werden zunächst an einem 1-Spinsystem, das an eine quantenmechanische Umgebung (Bad) koppelt, überprüft. Berechnungen dieser Art wurden bereits von P. Borowski in [17] durchgeführt. Abbildung 3.1 stellt das Gesamtsystem bestehend aus dem Spin und der angepassten Umgebung dar. Modelliert werden nur diejenigen Niveaus, welche auf Grund der schwachen Kopplung an das Spinsystem mit diesem in Resonanz sind. Das "reale" physikalische Bad mag aus einem Quasi-Kontinuum bestehen (vgl. Appendix A). Der Gesamt-Hamilton-Operator  $\hat{H}$  setzt sich nun zusammen aus (vgl. Gleichung 2.23)

$$\hat{H}_{ges} = \hat{H}_S + \kappa \cdot \hat{H}'_{WW} + \hat{H}_U. \quad (3.9)$$

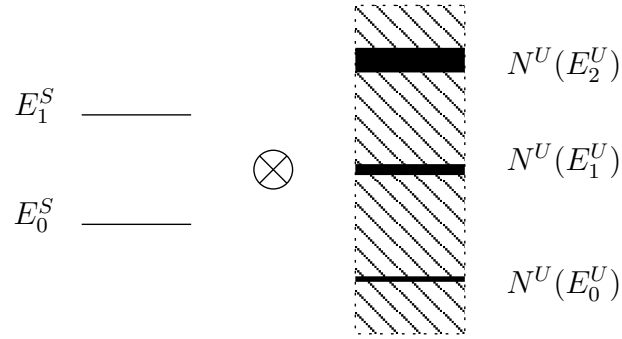


Abbildung 3.1.: 1-Spin und Umgebung. Die Anzahl der Entartungen der Umgebungs-Niveaus sind durch die Linienstärke symbolisiert.

Dabei ist  $\hat{H}_S$  der lokale Spin-Hamilton-Operator,  $\hat{H}'_{WW}$  der normierte Wechselwirkungsoperator und  $\kappa$  die dimensionslose Kopplungsstärke (vgl. Gleichung 3.8 und 3.7). Der Energieabstand  $\Delta E^{U/S}$  beträgt

$$\Delta E^U = E_1^U - E_0^U = E_2^U - E_1^U = E_1^S - E_2^S = \Delta E^S \equiv 1. \quad (3.10)$$

Für die nachfolgende Berechnung und Simulation wurde für die energieabhängige exponentielle Entartungsstruktur (vgl. 2.43,  $N_0^U = 25$ )

$$N^U(E_i^U) = 25 \cdot 2^{E_i^U} \quad \text{mit} \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.11)$$

gewählt. Die reziproke Temperatur  $\beta$  nimmt somit den Wert  $\beta = \ln 2$  an. Für die Entartung der Umgebungs-niveaus gilt:  $N^U(E_0^U) = 50$ ,  $N^U(E_1^U) = 100$  und  $N^U(E_2^U) = 200$ . Gleichung (2.41) liefert die zu erwartenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für den Spin-Zustand, unabhängig von der Anfangsverteilung  $W(U)$  und mit der vorher festgelegten Entartungsstruktur des Systems  $N^S(E^S) = 1$ :

$$W^d(E_0^S = 0) = \frac{2}{3} \quad W^d(E_1^S = 1) = \frac{1}{3} \quad (3.12)$$

Die reduzierte Dichtematrix des Spins sollte also folgende Form annehmen:

$$\rho^S = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Als Anfangszustand für die Simulation wurde ein Produktzustand der Form

$$|\psi(t=0)\rangle_{\text{ges}} = |\psi_S(t=0)\rangle \otimes |\psi_U(t=0)\rangle \quad (3.14)$$

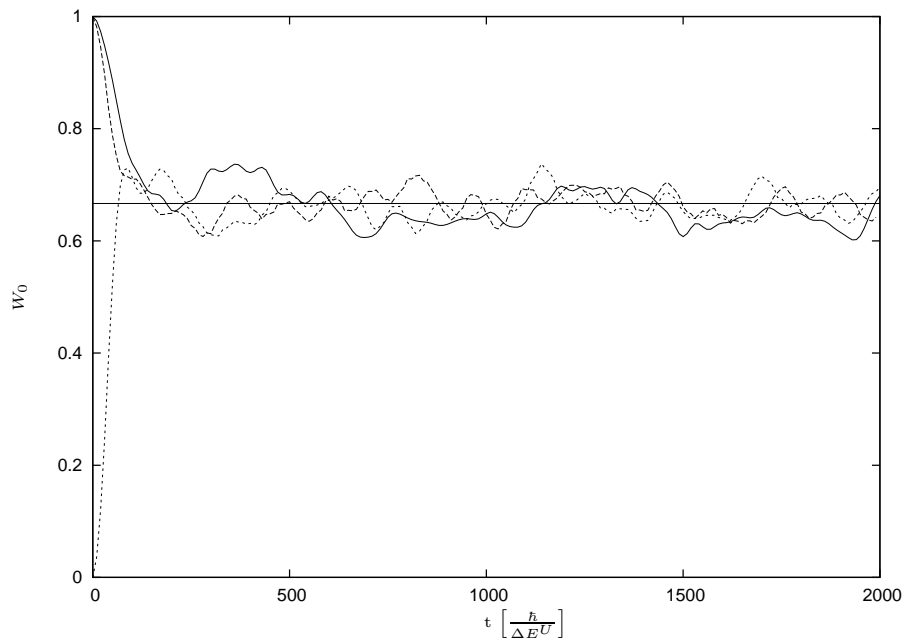


Abbildung 3.2.: Grundzustandsbesetzungswahrscheinlichkeit eines Spins für verschiedene Anfangszustände. Die waagrechte Linie ist der theoretisch zu erwartende Wert  $W^d(E_0^S) = \frac{2}{3}$ .

gewählt. Da die Energieverteilung zu Beginn scharf war, d. h. der Spin entweder “up“ oder “down“ und in der Umgebung nur ein Level besetzt war, ergab sich für den Anfangszustand

$$|\psi(t=0)\rangle_{\text{ges}} = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \leftarrow i. \quad (3.15)$$

Abbildung 3.2 zeigt die numerisch ermittelten Wahrscheinlichkeiten, den Spin im Grundzustand anzutreffen. Die waagrechte Linie ist die theoretisch zu erwartende Besetzungswahrscheinlichkeit des Spin-Grundzustands. Es wurden drei verschiedene Startwerte gewählt,  $i = 100, i = 300$  und  $i = 475$ . Alle drei Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit der in (3.12) berechneten Wahrscheinlichkeit. Weitere Größen wie Entropie und Purity werden hier nicht mehr untersucht. Ergebnisse darüber können in [17] nachgelesen werden.

### 3.2.2. Modulare Systeme

Wie im vorangehenden Kapitel gezeigt, relaxieren Systeme in ein thermisches Gleichgewicht unter Schrödinger-Dynamik und kanonischen Bedingungen. Die Beschränkung auf ein einfaches 2-Niveau-System ist nicht nötig. P. Borowski zeigte in [17], dass auch ein Mehr-Niveau-System bei kanonischer Ankopplung an eine quantenmechanische Umgebung einen thermischen Gleichgewichtszustand erreicht. Im Unterschied zur oben genannten Arbeit werden modular aufgebaute Systeme betrachtet, bestehend aus zwei, bzw. drei Spins. Da die Theorie aus Kapitel 2 keine zusätzlichen Forderungen an das System stellt (vgl. Kapitel 2.3.1), sollten auch modulare Systeme wie beschrieben einen Gleichgewichtszustand erreichen. Um die Gültigkeit der Theorie zu analysieren, wird die interne Kopplungsstärke variiert und verschiedene Kopplungsarten verwendet.

### 3.2.3. 2-Spinsystem

Ein System bestehend aus zwei Spins wird an eine quantenmechanische Umgebung gekoppelt. Abbildung 3.3 zeigt die System-Umgebungs-Kopplungstopologie. Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems hat dabei die Form

$$\hat{H}_{\text{ges}} = \hat{H}_S + \hat{H}_U + \kappa \cdot \hat{H}'_{WW} \quad (3.16)$$



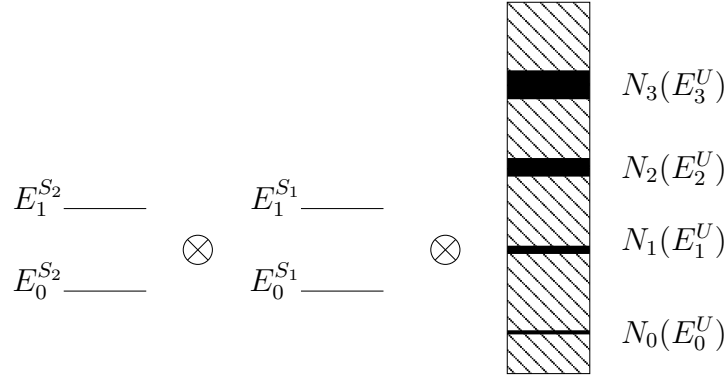


Abbildung 3.3.: Zwei Spins koppeln an eine Umgebung. Der Entartungsgrad ist durch die Liniendicke angedeutet.

Für den Spinsystem Operator gilt

$$\hat{H}_S = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \lambda \cdot \hat{H}'_{\text{int}} \quad (3.17)$$

Die interne Wechselwirkung  $\hat{H}'_{\text{int}}$  ist die “normierte“ Wechselwirkungsmatrix, wobei die Normierung wie in Gleichung 3.7 und 3.8 für die System-Umgebungs-kopplung berechnet wurde.  $\lambda$  ist der Kopplungsstärkeparameter für die interne Wechselwirkung. Es werden zwei unterschiedliche Spin-Spin-Wechselwirkungen  $\hat{H}_{\text{int}}$  untersucht. Einmal eine Heisenberg-Kopplung

$$\hat{H}_{\text{int}}^H = \sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i(1) \otimes \hat{\sigma}_i(2) \quad (3.18)$$

und eine zufällige Kopplung

$$\hat{H}_{\text{int}}^Z = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 p_{ij} \cdot \hat{\sigma}_i(1) \otimes \hat{\sigma}_j(2) \quad (3.19)$$

mit

$$p_{ij} = p_{ji}. \quad (3.20)$$

Das Spinsystem koppelt nur lokal via Spin (1) an die Umgebung. Um die geforderte Unterteilung in System und Umgebung zu erfüllen, wird die Eigenbasis des Spinsystems betrachtet. Die Umgebung wird so konstruiert<sup>2</sup>, dass Übergänge im Eigensystem möglich sind. In Abbildung 3.4 sind die möglichen

<sup>2</sup>Vergleiche zum Umgebungsdesign Anhang A.1.2.

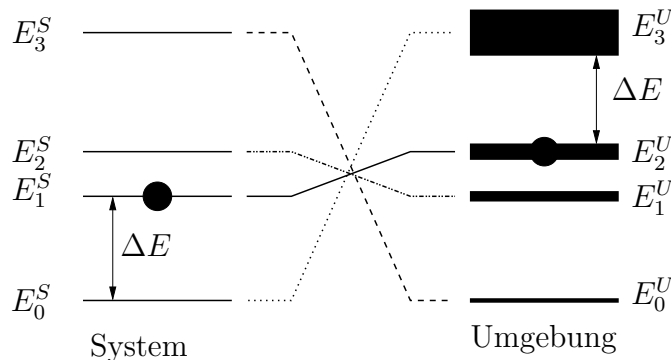


Abbildung 3.4.: Mögliche Übergänge des 2-Spins-Systems angekoppelt an eine Umgebung. Die Besetzung des Anfangszustands (Produktzustand) ist durch die schwarzen Punkte angedeutet.

Übergänge des Spinsystems in der Eigenbasis und die der Umgebung veranschaulicht.

Der theoretisch zu erwartende Gleichgewichtszustand für diese 4-Niveau-System wird mit Gleichung 2.41 berechnet. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Eigenzustände des 2-Spinsystems ergeben für eine zufällige Spin-Spin-Wechselwirkung mit den Parametern  $\lambda = 0.3$  und  $\kappa = 0.001$  die Werte  $W^d(E_0^S) = 0.429$ ,  $W^d(E_1^S) = 0.252$ ,  $W^d(E_2^S) = 0.216$  und  $W^d(E_3^S) = 0.103$ . Die zeitliche Schrödinger-Entwicklung der Besetzungszahlen  $W_i$  des 2-Spinsystems ist in Abbildung 3.5 zusammen mit den theoretisch zu erwartenden Gleichgewichtswerten (gerade Linien) dargestellt.

Die Heisenberg Kopplung mit den gleichen Werten für  $\lambda = 0.3$  und  $\kappa = 0.001$  liefert  $W^d(E_0^S) = 0.429$ ,  $W^d(E_1^S) = 0.327$ ,  $W^d(E_2^S) = 0.163$  und  $W^d(E_3^S) = 0.082$ . In Abbildung 3.6 ist die zeitliche Schrödinger-Entwicklung für die Heisenberg-Kopplung dargestellt.

Festzuhalten bleibt, dass für beide interne Wechselwirkungen das 2-Spinsystem in den theoretisch berechneten Gleichgewichtszustand (gerade Linien) relaxiert, obwohl jeweils nur ein Spin direkt mit der Umgebung in Wechselwirkung steht. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Theorie auch für Systeme gültig ist, die modular aufgebaut sind.

### Variation der Wechselwirkungsstärke

Die Ergebnisse in Abbildung 3.5 und 3.6 wurden jeweils mit bestimmten Werten für  $\lambda$  und  $\kappa$  berechnet. Nun soll untersucht werden, ob und wenn ja wie die Kopplungsstärke das Relaxationsverhalten beeinflusst. Dazu wird zunächst die

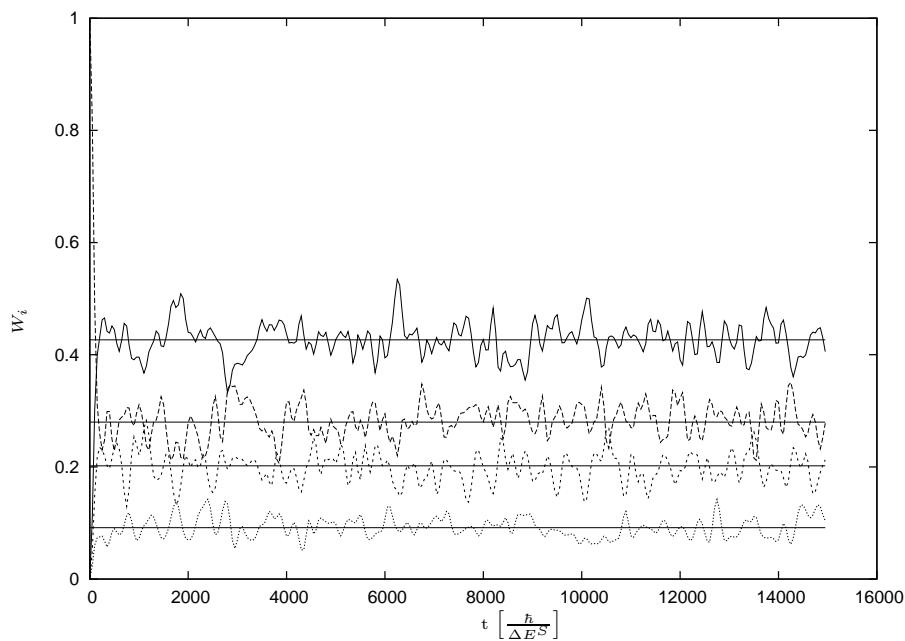


Abbildung 3.5.: Relaxation eines 2-Spinsystems unter Schrödinger-Dynamik mit zufälliger Kopplung in einen Gleichgewichtszustand. Die waagrechten Linien sind die theoretisch zu erwartenden Wahrscheinlichkeiten. Die durchgezogene Kurve ist die Wahrscheinlichkeit von  $W(E_0^S)$ , gestrichelt  $W(E_1^S)$ , fein gestrichelt  $W(E_2^S)$  und gepunktet  $W(E_3^S)$ .

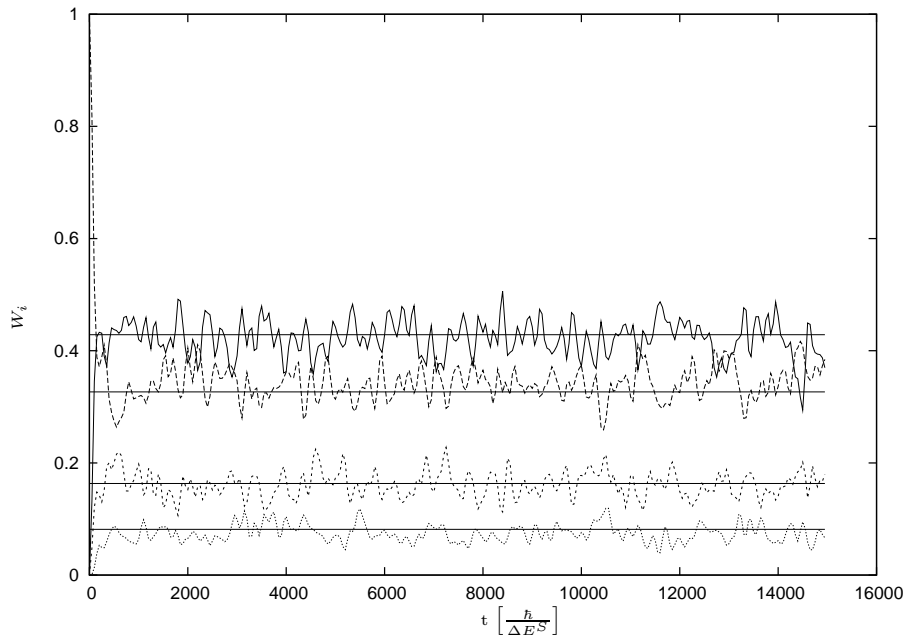


Abbildung 3.6.: Relaxation eines 2-Spinsystems unter Schrödinger-Dynamik mit Heisenberg-Kopplung in einen Gleichgewichtszustand. Die waagrechten Linien sind die theoretisch zu erwartenden Wahrscheinlichkeiten. Die durchgezogene Kurve ist die Wahrscheinlichkeit von  $W(E_0^S)$ , gestrichelt  $W(E_1^S)$ , fein gestrichelt  $W(E_2^S)$  und gepunktet  $W(E_3^S)$ .

interne Spin-Spin-Kopplung  $\lambda$  variiert, wobei die System-Umgebungs-Wechselwirkung  $\kappa = 0.001$  nicht verändert wird. Verglichen werden die Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$  des Spinsystems mit der Umgebungstemperatur  $T_B$  und den beiden lokalen Spintemperaturen  $T_{\text{lok}}^n$ .

Die Umgebungstemperatur  $T_B$  wird folgendermaßen bestimmt: Besitzt die Umgebung eine energieabhängige Entartung der Form

$$N^U(E_i^U) = N_0 \cdot 2^{E_i^U}, \quad (3.21)$$

erhält man mit Gleichung 2.48 die reziproke Temperatur (in Einheiten von  $\Delta E$ )

$$\beta = \frac{1}{k_B T_B} = \ln 2 \quad (3.22)$$

Die Umgebung prägt über diese energieabhängige Entartungsstruktur dem System die Temperatur  $T_B$  ein. Über die einzelnen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten  $W(E_i^S)$  des Spinsystems wird für jedes  $\lambda$  die Spektraltemperatur des Spinsystems mit Gleichung 2.49 berechnet. Stimmen beide Temperaturen überein, stellt sich ein Gleichgewichtszustand, wie ihn Gleichung 2.41 voraussagt, ein. Die einzelnen ‘‘Paar‘‘-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^n$  der beiden Spins ( $n = 1, 2$ ) wurden mit Hilfe der Wahrscheinlichkeiten  $W(E_i^{S_n})$

$$\frac{W(E_1^{S_n})}{W(E_0^{S_n})} = e^{\beta(E_1^{S_n} - E_0^{S_n})} \quad (3.23)$$

bestimmt. Für die lokalen ‘‘Paar‘‘-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^n$  gilt somit

$$k_B \cdot T_{\text{lok}}^n = \frac{1}{\beta_{\text{lok}}^n} = \frac{1}{\Delta E} \ln \frac{W(E_1^n)}{W(E_0^n)} \quad (3.24)$$

Für die verschiedenen Kopplungsstärken  $\lambda$  wurde eine vollständige Schrödinger-Dynamik in den Gleichgewichtszustand durchgeführt und anschließend die globale und lokale Temperatur berechnet. Die genaue Beschreibung der Simulation ist im Appendix beschrieben. Das Ergebnis für eine zufällige Spin-Spin-Kopplung ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Abbildung 3.8 zeigt das Ergebnis für ein Heisenberg gekoppeltes 2-Spinsystem.

Aufgetragen für die globale Temperatur ist die Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$ . Die globale Temperatur des 2-Spinsystems bleibt konstant auf der von der Umgebung eingprägten Temperatur von  $k_B \cdot T_B = \frac{1}{\ln 2} = 1.44$ . Die beiden lokalen Temperaturen von Spin (1) und (2) sind fast identisch. Sie steigen aber im Gegensatz zur globalen Temperatur mit zunehmender interner Wechselwirkungsstärke an. Dies ist auf Korrelationen (klassische wie quantenmechanische) der

### 3. Thermisches Verhalten von Spinsystemen unter Schrödinger-Dynamik

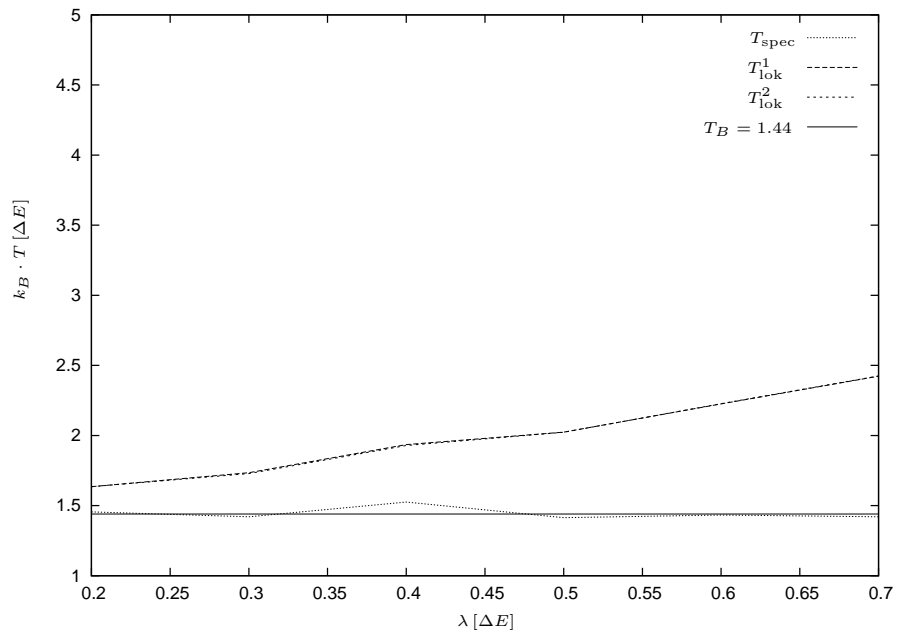


Abbildung 3.7.: Globale und lokale Temperatur in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer zufälligen Spin-Spin-Kopplung.

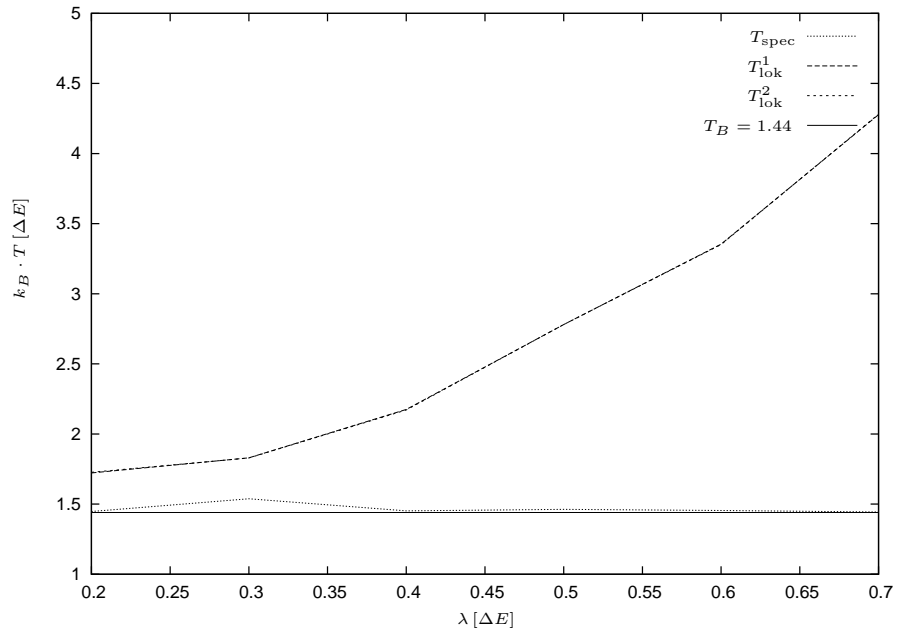


Abbildung 3.8.: Globale und lokale Temperatur in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer Heisenberg Spin-Spin-Kopplung

beiden Spins untereinander zurückzuführen. Mit wachsendem  $\lambda$  verschränken beide Spins und die lokale Entropie nimmt zu, weshalb die lokale Temperatur scheinbar steigt.

Um diese Korrelationen zu untersuchen, wurde als Maß

$$C = \text{Tr}(\rho_1 \otimes \rho_2 - \rho_S)^2, \quad (3.25)$$

mit den beiden reduzierten Dichtematrizen  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  der beiden Spins und der Systemdichtematrix  $\rho_S$ , benutzt. Abbildung 3.9 und 3.10 zeigt die Korrelation in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke  $\lambda$ . Es ist mit zunehmendem  $\lambda$  ein deutlicher Anstieg der Korrelationen zu beobachten. Im Unterschied zur zufälligen Kopplung zeigt das Heisenberg gekoppelte Spinsystem eine stärkere Zunahme der Korrelationen und der Temperatur. Dieser Effekt könnte durch eine unterschiedlich starke Kopplung verursacht werden, trotz der angewandten Normierung (vgl. Kapitel 3.1.3). Diese Normierung ist für große Dimensionen gut, bei niederdimensionalen Matrizen wie hier evtl. nicht ausreichend. Die Heisenberg-Kopplungsmatrix enthält mehr Nullen als die zufällige, weshalb die wenigen Einträge stärker ins Gewicht fallen.

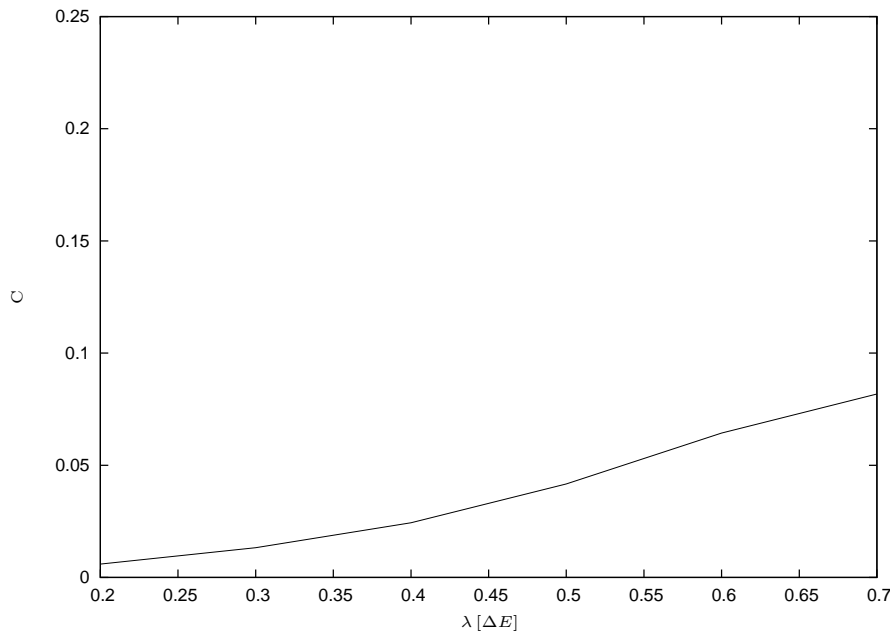


Abbildung 3.9.: Korrelationen  $C$  in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer zufälligen Wechselwirkung.  $C$  ist in Gleichung 3.25 definiert.

Verändert man die Kopplungsstärke  $\kappa$  zwischen dem System und der Umgebung, verläßt man mit zunehmenden  $\kappa$  den Schwach-Kopplungs-Limes. Die

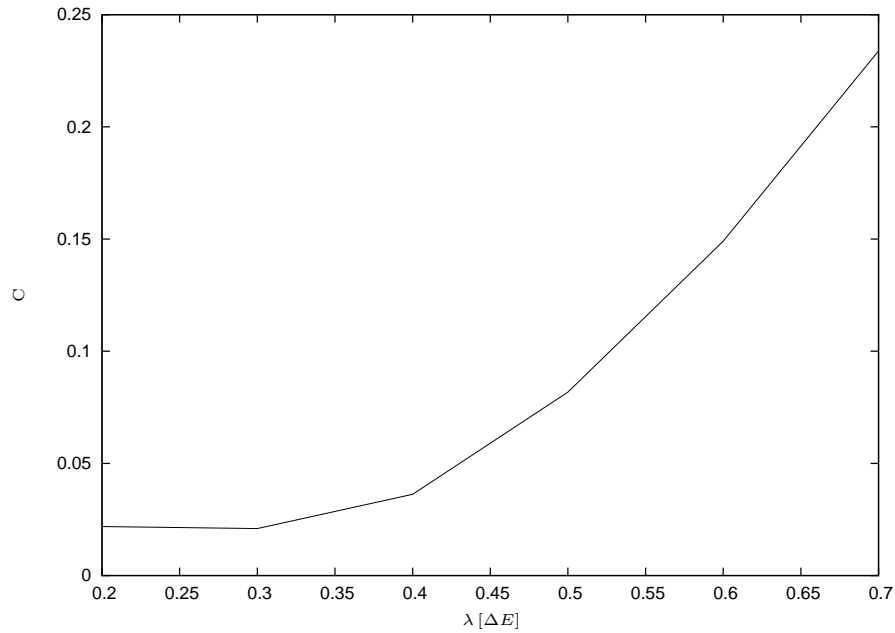


Abbildung 3.10.: Korrelationen  $C$  in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer Heisenberg-Wechselwirkung.  $C$  ist in Gleichung 3.25 definiert.

Aussagen der Theorie verlieren dann ihre Gültigkeit. Um dies zu untersuchen, wurde für ein konstantes  $\lambda = 0.3$  die Wechselwirkung  $\hat{H}'_{WW}$  mit dem Parameter  $\kappa$  variiert. Die Abweichung der simulierten Dichtematrix  $\rho_{\text{sim}}$  von der theoretisch zu erwartenden  $\rho_{\text{theo}}$  wurde mit dem Abstandsmaß

$$D = \text{Tr}(\rho_{\text{sim}} - \rho_{\text{theo}})^2 \quad (3.26)$$

ermittelt. Die Einträge der Dichtematrix  $\rho_{\text{theo}}$  erhält man über die Wahrscheinlichkeiten, welche mit Gleichung 2.44 ermittelt werden,

$$\rho_{\text{theo}}^{ii} = W^d(E_i^S) \quad \text{und} \quad \rho_{\text{theo}}^{ij} = 0. \quad (3.27)$$

Das Ergebnis ist in Abbildung 3.11 für verschiedene Umgebungsgrößen dargestellt. Es ist ein deutlicher Anstieg von  $D$  zu erkennen, unabhängig von der Größe der Umgebung. Die etwas unterschiedlichen Verläufe der drei Kurven sind vermutlich auf verschiedene Zufallsmatrizen für die Wechselwirkung zurückzuführen.



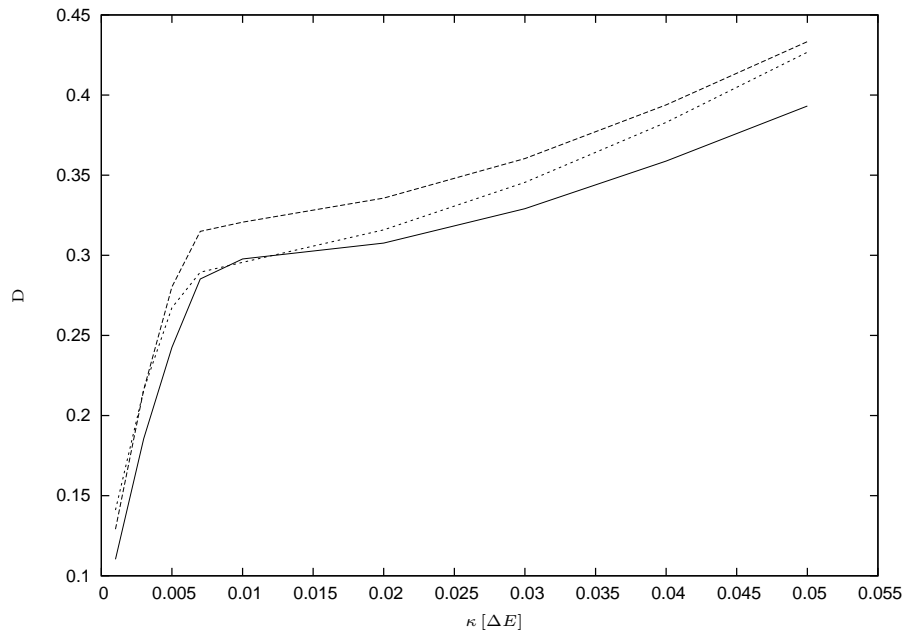


Abbildung 3.11.: Abweichung  $D$  (vgl. Gleichung 3.27) in Abhängigkeit von der System-Umgebungskopplung  $\kappa$ . Die durchgezogene Linie wurde für  $N_0 = 10$ , die gestrichelte für  $N_0 = 15$  und die fein gestrichelte für  $N_0 = 19$  berechnet.

### 3.2.4. 3-Spinsystem

Das Spinsystem wird nun um einen weiteren Spin erweitert und besteht aus drei Spins. In Abbildung 3.12 ist die Kopplungstopologie dargestellt. Auch hier koppelt nur ein Spin an die quantenmechanische Umgebung. Der Hamilton-

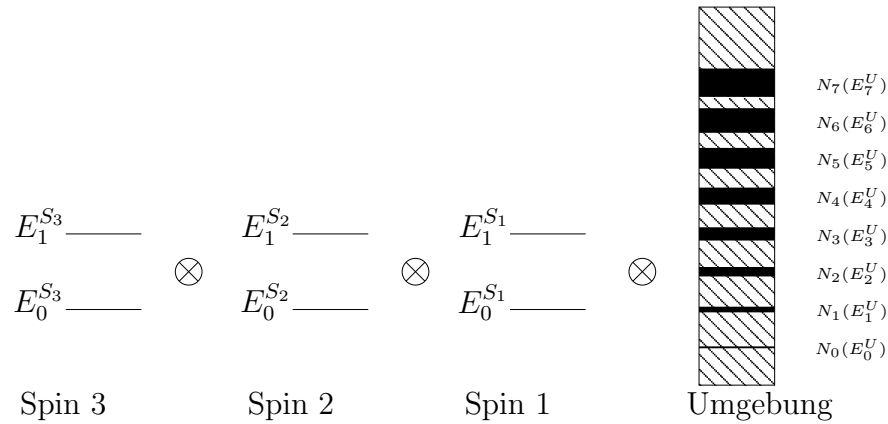


Abbildung 3.12.: Kopplungstopologie von drei Spins gekoppelt an eine Umgebung. Der Entartungsgrad ist durch die Liniendicke angedeutet.

Operator  $\hat{H}_{ges}$  des Gesamt-Systems lautet:

$$\hat{H}_{ges} = \hat{H}_S + \hat{H}_U + \kappa \cdot \hat{H}'_{WW} \quad (3.28)$$

Der Spinsystem Hamilton-Operator setzt sich zusammen aus

$$\hat{H}_S = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \lambda \cdot \hat{H}'_{int} \quad (3.29)$$

Der normierte interne Wechselwirkungsoperator  $\hat{H}'_{int}$  besteht aus einer nächster Nachbarwechselwirkung und enthält entweder eine zufällige Kopplung

$$\hat{H}'_{int} = \sum_{\mu=1}^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 p_{ij} \cdot \hat{\sigma}_i(\mu) \otimes \hat{\sigma}_j(\mu+1) \quad (3.30)$$

mit

$$p_{ij} = p_{ji}, \quad (3.31)$$

oder eine Heisenberg-Kopplung

$$\hat{H}'_{int} = \sum_{\mu=1}^2 \sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i(\mu) \otimes \hat{\sigma}_i(\mu+1). \quad (3.32)$$

Die Vorgehensweise zur Untersuchung der thermischen Eigenschaften des 3-Spinsystems war die gleiche wie im vorangehenden Abschnitt. In Abbildung 3.13 ist die Relaxation unter Schrödinger-Dynamik in einen Gleichgewichtszustand des 3-Spinsystems für die Kopplungsparameter  $\lambda = 0.01$  und  $\kappa = 0.001$  sowie die theoretisch zu erwartenden Besetzungswahrscheinlichkeiten dargestellt. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten wurden mit Gleichung 2.42 berechnet. Alle drei Spins waren untereinander zufällig gekoppelt. Auch das 3-Spinsystem relaxiert in einen Gleichgewichtszustand, der mit dem theoretisch zu erwartenden Gleichgewichtszustand übereinstimmt.

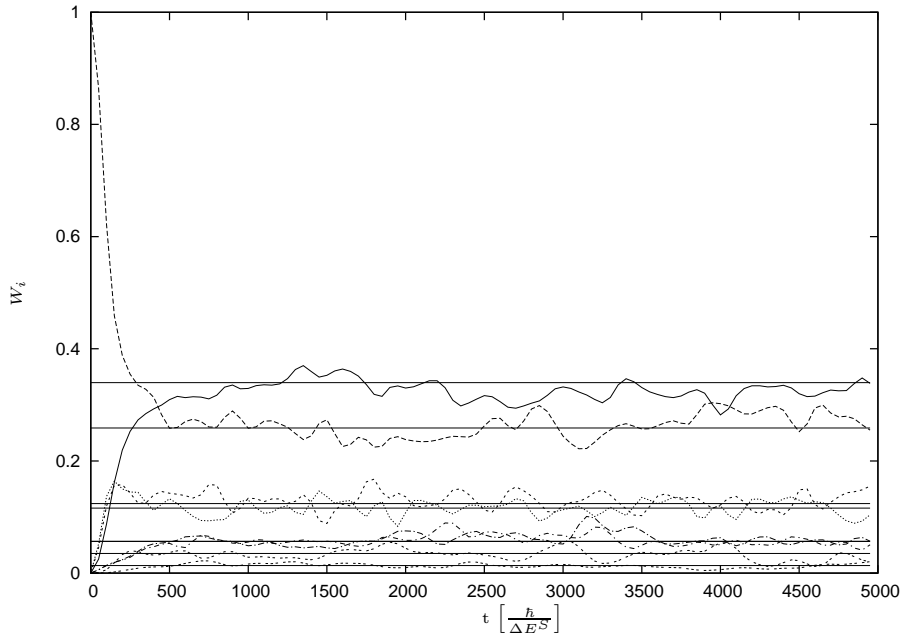


Abbildung 3.13.: Relaxation eines 3-Spinsystems unter Schrödinger-Dynamik mit zufälliger Kopplung in einen Gleichgewichtszustand. Die waagrechten Linien sind die theoretisch zu erwartenden Wahrscheinlichkeiten. Die durchgezogene Linie ist die simulierte Wahrscheinlichkeit  $W(E_0^S)$ , die gestrichelte von  $W(E_1^S)$ , usw.

### Variation der Kopplung

Zur Untersuchung des thermischen Verhalten des 3-Spinsystems wird ebenfalls die Kopplungsstärke  $\lambda$  der Spin-Spin-Wechselwirkung variiert. Analysiert wurde die globale, bzw. Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$  des Spinsystems und die lokale

### 3. Thermisches Verhalten von Spinsystemen unter Schrödinger-Dynamik

Temperatur  $T_{\text{lok}}^n$  der einzelnen Spins, sowie Korrelationen der Spins. Die globale Temperatur für das 3-Spinsystem wurde mit Gleichung 2.49, die lokalen Spin-Temperaturen mit 2.51 bestimmt. Als Maß für Korrelationen wurde Gleichung 3.25 verwendet. Die Umgebungstemperatur wurde wieder auf den Wert  $T_B = \frac{1}{\ln 2} = 1.44$  eingestellt, welche wie in Gleichung 3.21 über die Entartungsstruktur festgelegt wurde.

Abbildung 3.14 und 3.15 zeigen die globale und die lokalen Temperaturen in Abhängigkeit von  $\lambda$  (Spin-Spin-Kopplung) für eine zufällige interne Kopplung und für eine Heisenberg-Kopplung. Die globale Temperatur ist unabhängig von der internen Wechselwirkungsstärke und erreicht den Wert, welcher von der Umgebung eingepreßt wurde,  $T_B = \frac{1}{\ln 2}$ . Im Gegensatz dazu ändert sich die lokale Spin-Temperatur wie bei dem untersuchten 2-Spinsystem mit zunehmenden  $\lambda$ .

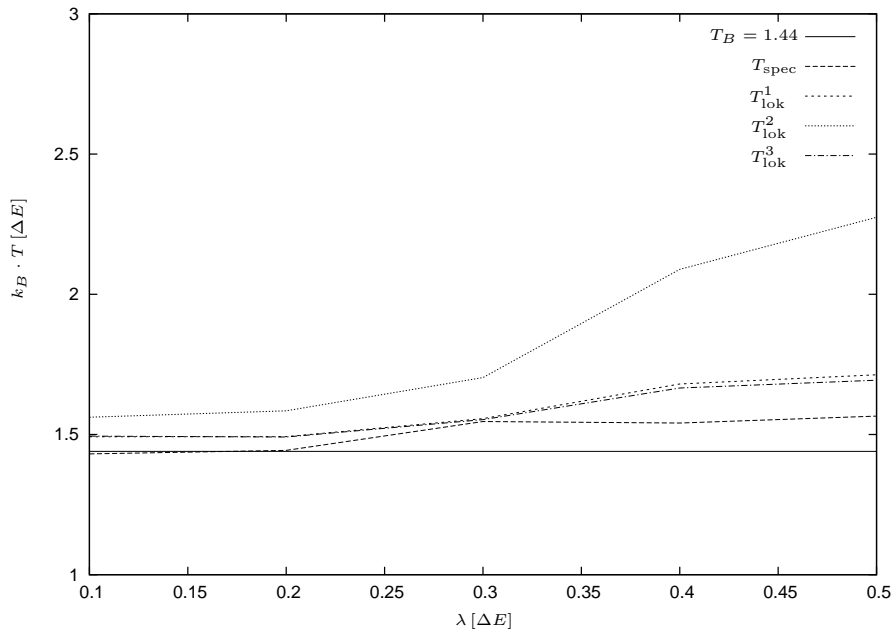


Abbildung 3.14.: Globale und lokale Temperatur in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer zufälligen Spin-Spin-Kopplung. Die Temperaturen von Spin (1) und (3) sind fast identisch.

Bei beiden Wechselwirkungen ist ein Anstieg der lokalen Temperatur zu erkennen, was wieder auf Korrelationen der einzeln Spins und einer damit verbundenen Zunahme der Entropie zurückzuführen ist. Der mittlere Spin (2) hat von Beginn an eine höhere Temperatur als die beiden äußeren und weist eine stärkere Abhängigkeit von  $\lambda$  auf. Dies ist zurückzuführen auf eine höhere

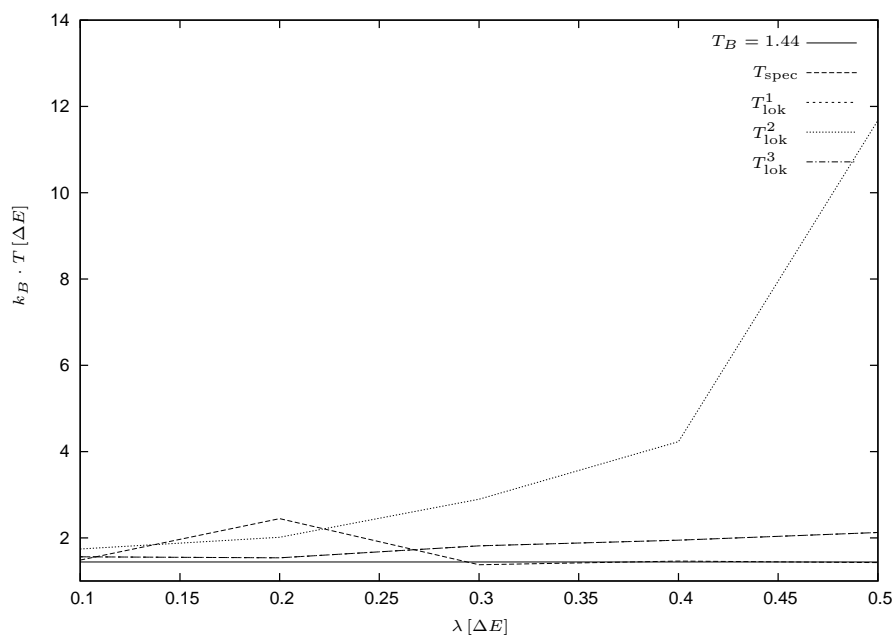


Abbildung 3.15.: Globale und lokale Temperatur in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  einer Heisenberg Spin-Spin-Kopplung. Die Temperatur von Spin (1) und (3) sind identisch.

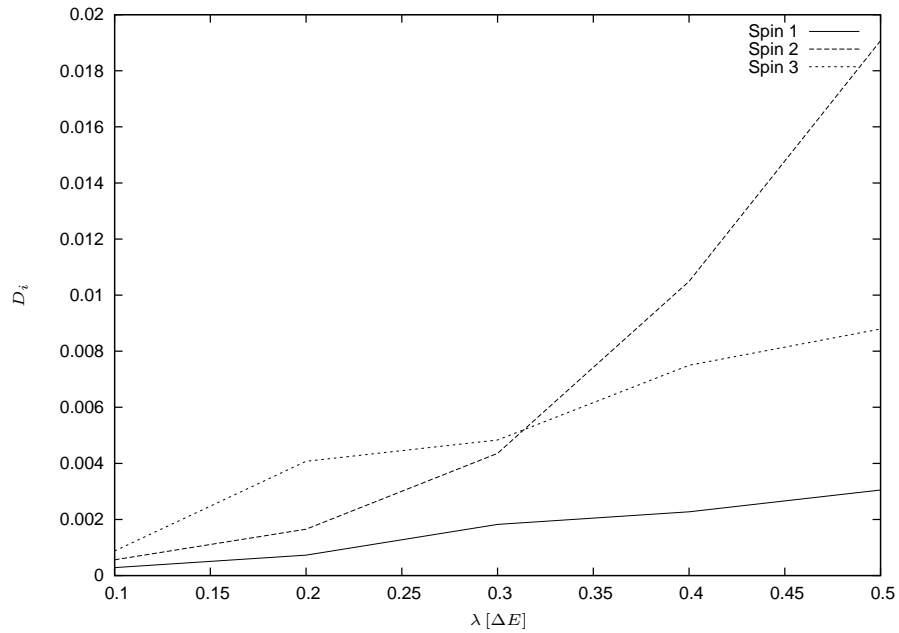


Abbildung 3.16.: Korrelation  $D_i$  (vgl. Gleichung 3.33) der einzelnen Spins in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  bei einer zufälliger Kopplung

Anzahl von Korrelationen, die sich ausbilden. Im Gegensatz zu den beiden “Rand“-Spins verschränkt der mittlere Spin mit zwei Spins. In Abbildung 3.16 und 3.17 ist das Korrelationsabstandsmaß

$$D_i = \text{Tr} (\rho_{eq} - \rho_i)^2 \quad (3.33)$$

( $\rho_{eq}$  ist der lokale Gleichgewichtszustand,  $\rho_i$  der berechnete Zustand des  $i$ -ten Spins) in Abhängigkeit von  $\lambda$  aufgetragen. Das höhere Maß an Korrelationen des mittleren Spins ist deutlich zu erkennen, wohingegen beide Randspins in etwa die gleichen Werte annehmen.

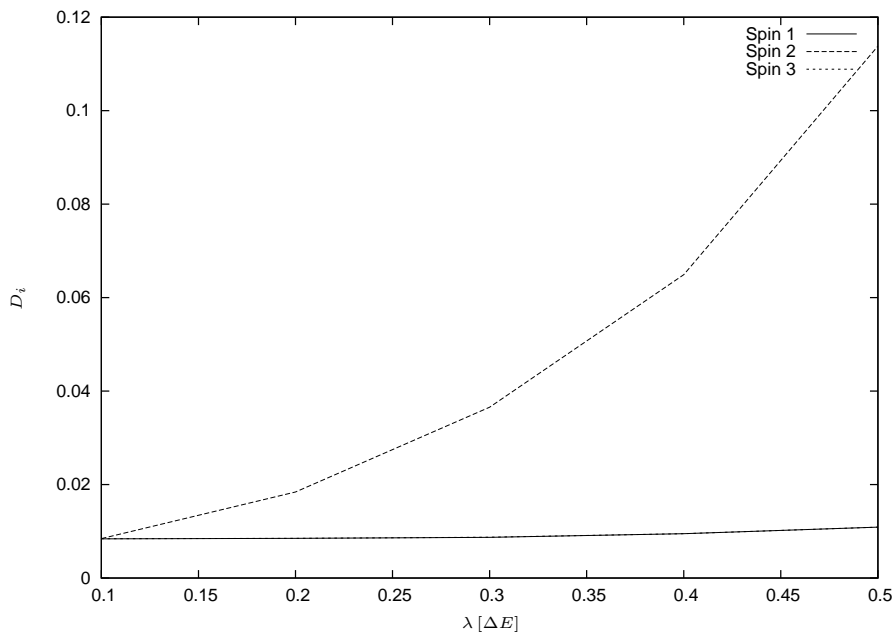


Abbildung 3.17.: Korrelation  $D_i$  (vgl. Gleichung 3.33) der einzelnen Spins in Abhängigkeit der Kopplungsstärke  $\lambda$  bei einer Heisenberg Kopplung. Die Kurve für Spin (1) und (3) ist identisch.





# 4. Temperaturfluktuationen

Anhand der in Kapitel 3 untersuchten Relaxationen ins thermische Gleichgewicht einer Spin-Kette, bestehend aus zwei oder drei Spins, wird analysiert, in wie weit (zeitliche) Temperaturfluktuationen auftreten.

## 4.1. Berechnung der Fluktuationen

Betrachtet wird das 2-Spinsystem, gekoppelt an eine quantenmechanische Umgebung mit einer zufälligen Spin-Spin-Wechselwirkung (vgl. Gleichung 3.16, 3.17 und 3.19) aus Kapitel 3.2.3. Für jeden Kopplungsparameter  $\lambda$  wird der Erwartungswert für  $\beta$

$$\widehat{\beta}(t) = \sum_i \frac{W_i}{1 - W_0} b_i(t), \quad (4.1)$$

die Varianz

$$V(\beta(t)) = \sum_i \frac{W_i}{1 - W_0} \cdot (b_i(t) - \widehat{\beta}(t))^2 \quad (4.2)$$

und die Streuung

$$\sigma(\beta(t)) = \sqrt{V(\beta(t))} \quad (4.3)$$

berechnet.  $b_i$  ist die  $i$ -te Komponente der Spektraltemperatur (vgl. Gleichung 2.50). Abweichungen vom kanonischen Zustand werden über das Verhältnis

$$\frac{\sigma(\beta(t))}{\widehat{\beta}(t)} \quad (4.4)$$

berechnet und zeitlich gemittelt (siehe Abbildung 4.1)

$$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\widehat{\beta}(t)} \right\rangle_t. \quad (4.5)$$

#### 4. Temperaturfluktuationen

Diese Abweichung wird verglichen mit Temperaturfluktuationen, welche über

$$\frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \hat{\beta} \rangle_t} \quad (4.6)$$

berechnet werden. Dabei ist

$$\langle \hat{\beta} \rangle_t = \frac{1}{T} \sum_{s=0}^T \hat{\beta}(s) \quad (4.7)$$

der zeitliche Mittelwert der Spektraltemperatur und

$$\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t = \frac{1}{T} \sum_{s=0}^T \left( \hat{\beta}(s) - \langle \hat{\beta} \rangle_t \right)^2 \quad (4.8)$$

die Abweichung der Spektraltemperatur von deren zeitlichem Mittel.  $T$  ist die Anzahl der Rechenschritte. In Abbildung 4.2 ist der Ausdruck 4.6 grafisch dargestellt. Die Relation

$$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\hat{\beta}(t)} \right\rangle_t \stackrel{?}{\cong} \frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \hat{\beta} \rangle_t}, \quad (4.9)$$

ermöglicht nun, eine Aussage über die möglicherweise auftretenden Temperaturfluktuationen zu treffen.

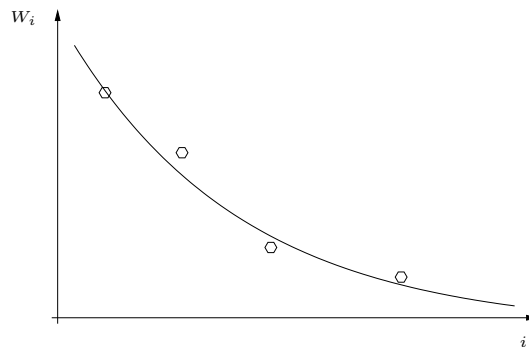


Abbildung 4.1.: Abweichungen der Besetzungswahrscheinlichkeiten  $W_i$  von der kanonischen Verteilung (durchgezogene Linie).

Gilt

$$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\hat{\beta}(t)} \right\rangle_t > \frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \hat{\beta} \rangle_t}, \quad (4.10)$$

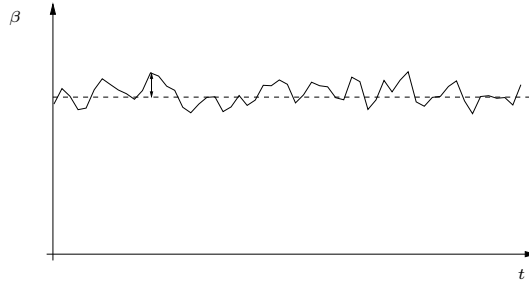


Abbildung 4.2.: Abweichungen des Erwartungswerts um den zeitlichen Mittelwert (gestrichelte Linie).

sind die Fluktuationen der Besetzungszahlen nicht mehr sinnvoll als Temperaturschwankung interpretierbar, da dann die Abweichungen vom kanonischen Zustand größer sind als die zeitlichen Fluktuationen der spektralen Temperatur. Von Temperaturfluktuation sollte man reden können, wenn der Wert von Gleichung 4.5 um mindestens eine Größenordnung kleiner als der von 4.6 wäre. Dann wäre die kanonische Verteilung zu jedem Zeitpunkt recht gut realisiert.

#### 4.1.1. Ergebnisse

In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse für ein 2-Spinsystem dargestellt. Für das 3-

$\lambda$	$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\hat{\beta}(t)} \right\rangle_t$	$\frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \hat{\beta} \rangle_t}$
0.1	0.22	0.28
0.2	0.18	0.23
0.3	0.18	0.25
0.4	0.38	0.32
0.5	0.20	0.34
0.6	0.25	0.39

Tabelle 4.1.: Abweichungen für ein 2-Spinsystem, Heisenberg gekoppelt

Spinsystem wurden ebenfalls die Abweichungen wie beschrieben, errechnet. In Tabelle 4.2 sind die Werte für eine zufällige interne Kopplung dargestellt und in Tabelle 4.3 für ein Heisenberg gekoppeltes Spinsystem. Die Werte in den drei Tabellen zeigen, dass die Fluktuationen nicht als reine Temperaturschwankungen auftreten. Die Verminderung der Abweichungen mit zunehmendem  $\lambda$ , speziell in Tabelle 4.3, sind zurückzuführen auf die größeren Umgebungsdimensionen.

#### 4. Temperaturfluktuationen

$\lambda$	$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\beta(t)} \right\rangle_t$	$\frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \beta \rangle_t}$
0.1	0.23	0.19
0.2	0.33	0.3
0.3	0.45	0.3
0.4	0.29	0.2
0.5	0.22	0.18

Tabelle 4.2.: Abweichungen für ein 3-Spinsystem, zufällig gekoppelt

$\lambda$	$\left\langle \frac{\sigma(\beta(t))}{\beta(t)} \right\rangle_t$	$\frac{\sqrt{\langle \delta\beta^2(t) \rangle_t}}{\langle \beta \rangle_t}$
0.1	0.75	0.55
0.2	1.29	0.44
0.3	0.15	0.12
0.4	0.11	0.12
0.5	0.08	0.05

Tabelle 4.3.: Abweichungen für ein 3-Spinsystem, Heisenberg gekoppelt

# 5. Offene Quanten-Systeme

## 5.1. Einleitung

Für ein abgeschlossenes System ist der Hamilton-Operator zeitunabhängig. Alle Eigenzustände des Systems sind also stationär (vgl. Schrödinger-Gleichung 2.1). Bei offenen Systemen, z. B. Systemen welche in Kontakt mit einem Wärmebad sind, finden Übergänge im System statt, welche stochastisch mit Übergangswahrscheinlichkeiten ausgedrückt werden können. Die Dynamik wird dann mit Hilfe einer Raten- oder Mastergleichung beschrieben (siehe [18]).

Ein bewährter Ansatz zur Beschreibung offener quantenmechanischer Systeme, welche an eine Umgebung koppeln, ist die Quanten-Master-Gleichung. Für die nachfolgenden Betrachtungen wird immer eine schwache Kopplung des Systems an die Umgebung angenommen sowie die Erfüllung der Markov-Bedingung. Im Gegensatz zur "Schrödinger-Relaxation" werden hier also Gedächtniseffekte vernachlässigt. Die hier dargestellte Herleitung orientiert sich an [19].

## 5.2. Quanten Mastergleichung

### 5.2.1. Herleitung der Mastergleichung

Der Gesamt-Hamilton-Operator eines Systems  $S$ , welches an eine Umgebung  $U$  gekoppelt ist, wird beschrieben durch

$$H = H_S + H_U + H_{WW} \quad (5.1)$$

$H_S$  ist der Hamiltonian des Systems,  $H_U$  der der Umgebung und  $H_{WW}$  beschreibt die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung. Die Dynamik wird wieder durch die von-Neumann Gleichung beschrieben, die im Wechselwirkungsbild die Form<sup>3</sup>

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i [H_{WW}(t), \rho(t)] \quad (5.2)$$

---

<sup>3</sup>Es gilt hier  $\hbar = 1$

## 5. Offene Quanten-Systeme

annimmt. Die Integralform lautet

$$\rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t [H_{WW}(s), \rho(s)] ds \quad (5.3)$$

$\rho(t)$  ist die Dichtematrix des gesamten Systems. Setzt man Gleichung 5.3 in 5.2 und spürt die Umgebung aus, erhält man

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = - \int_0^t \text{Tr}_U [H_{WW}(t), [H_{WW}(s), \rho(s)]] ds, \quad (5.4)$$

falls

$$\text{Tr}_U [H_{WW}(t), \rho(0)] = 0 \quad (5.5)$$

gilt. Da die Kopplung zwischen System und Umgebung schwach und die Umgebung sehr groß sein soll, hat die Wechselwirkung auf die Dichtematrix  $\rho_U$  der Umgebung so gut wie keinen Einfluss. Es gilt somit für die Dichtematrix

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_U. \quad (5.6)$$

Einsetzen von 5.6 in 5.4 liefert

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = - \int_0^t \text{Tr}_U [H_{WW}(t), [H_{WW}(s), \rho_S(s) \otimes \rho_U]] ds \quad (5.7)$$

Gleichung 5.7 ist noch von der Wahl des Anfangszustands ( $t=0$ ) abhängig, weshalb die Dynamik noch nicht durch eine dynamische Halb-Gruppe beschrieben wird. Verwendet man die Markov-Näherung, welche ein coarse-graining Effekt der Zeitskala annimmt, erhält man aus Gleichung 5.7 mit  $\rho_S(s) \simeq \rho_S(t)$

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = - \int_0^\infty \text{Tr}_U [H_{WW}(t), [H_{WW}(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_U]] ds, \quad (5.8)$$

wobei  $s$  durch  $t-s$  substituiert und die Integralgrenze  $t \rightarrow \infty$  gesetzt wurde. Coarse-graining der Zeitskala bedeutet, dass die Übergänge in der Umgebung sehr viel schneller vorgehen, als die zeitliche Entwicklung des Systems. Außerdem sollen die Korrelationsfunktionen der Umgebung ebenfalls sehr viel schneller zerfallen als die Schwankungen des Systems. Dadurch können Gedächtniseffekte der Umgebung vernachlässigt werden.

Gleichung 5.8 definiert noch nicht zwingend einen Generator einer dynamischen Halb-Gruppe. Um dies zu erreichen, wird noch die sogenannte "rotating

wave approximation“ berücksichtigt. Diese mittelt schnelle Oszillationen aus der Mastergleichung heraus. Der Wechselwirkungsoperator  $\hat{H}_{WW}$  wird dazu in der allgemeinen Form

$$\hat{H}_{WW} = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha} \otimes \hat{B}_{\alpha} \quad (5.9)$$

dargestellt.  $\hat{A}_{\alpha}$  sind System- und  $\hat{B}_{\alpha}$  Umgebungsoperatoren. Die Näherung besteht nun darin,  $\hat{H}_{WW}$  im Schrödingerbild aus Eigenoperatoren des System-Hamiltonoperators  $\hat{H}_S$  darzustellen. Bei einem diskreten Spektrum von  $\hat{H}_S$  mit dem Eigenwert  $\epsilon$  und dem zugehörigen Projektionsoperator  $\hat{\Pi}(\epsilon)$  gilt

$$\hat{A}_{\alpha}(\omega) = \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \hat{\Pi}(\epsilon) \hat{A}_{\alpha} \hat{\Pi}(\epsilon'). \quad (5.10)$$

Dadurch gelten folgende Kommutatorbeziehungen:

$$[\hat{H}_S, \hat{A}_{\alpha}(\omega)] = -\omega \hat{A}_{\alpha}(\omega), \quad (5.11)$$

$$[\hat{H}_S, \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega)] = \omega \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega), \quad (5.12)$$

$$[\hat{H}_S, \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \hat{A}_{\alpha}(\omega)] = 0 \quad (5.13)$$

und

$$\hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = \hat{A}_{\alpha}(-\omega). \quad (5.14)$$

Durch die Vollständigkeitsrelation und Summation von 5.10 über alle Energieunterschiede  $\omega$  erhält man

$$\sum_{\omega} \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) = \sum_{\omega} \hat{A}_{\alpha}(\omega) = \hat{A}_{\alpha}. \quad (5.15)$$

$\hat{H}_{WW}$  kann mit Gleichung 5.15 in die Form

$$\hat{H}_{WW} = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \hat{A}_{\alpha}(\omega) \otimes \hat{B}_{\alpha} = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes \hat{B}_{\alpha}^{\dagger} \quad (5.16)$$

gebracht werden. Im Wechselwirkungsbild nimmt der Wechselwirkungsoperator

$$\hat{H}_{WW}(t) = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \hat{A}_{\alpha}(\omega) \otimes \hat{B}_{\alpha} = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} e^{i\omega t} \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \otimes \hat{B}_{\alpha}^{\dagger} \quad (5.17)$$

## 5. Offene Quanten-Systeme

die Form an, wobei

$$\hat{B}_\alpha(t) = e^{i\hat{H}_B t} \hat{B}_\alpha e^{-i\hat{H}_B t} \quad (5.18)$$

der Umgebungsoperator im Wechselwirkungsbild ist. Aus 5.5 wird

$$\langle \hat{B}_\alpha(t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{B}_\alpha(t) \rho_B \right\} = 0, \quad (5.19)$$

d.h., dass die Umgebung im Mittel verschwindet. Durch Einsetzen von Gleichung 5.17 in 5.8 erhält man die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_S(t)}{dt} &= \int_0^\infty \left( \text{Tr}_U \left\{ H_{WW}(t-s) \rho_S(t) \rho_U(t) H_{WW}(t) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - H_{WW}(t) H_{WW}(t-s) \rho_S(t) \rho_U \right\} + c.c. \right) ds \\ &= \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( \hat{A}_\beta(\omega) \rho_S(t) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') - \right. \\ &\quad \left. - \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \hat{A}_\beta(\omega) \rho_S(t) \right) + c.c. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Die

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega s} \langle \hat{B}_\alpha^\dagger(t) \hat{B}_\beta(t-s) \rangle \quad (5.21)$$

sind Fouriertransformierte der Umgebungs-Korrelationsfunktionen

$$\langle \hat{B}_\alpha^\dagger(t) \hat{B}_\beta(t-s) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{B}_\alpha^\dagger(t) \hat{B}_\beta(t-s) \right\}. \quad (5.22)$$

Gleichung 5.20 läßt sich in Lindbladform darstellen:

$$\mathcal{L}\rho(t) = -i[H, \rho_S] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (5.23)$$

$\mathcal{D}(\rho_S(t))$  ist der sogenannte Dissipationsterm. Für ihn gilt

$$\mathcal{D}(\rho_S(t)) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( A_\beta(\omega) \rho_S A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S \} \right) \quad (5.24)$$

Das Integral über  $s$  liefert eine Deltafunktion  $\delta(\omega - \omega')$ , weshalb im Dissipationsterm nur resonante Terme erhalten bleiben.  $A$  und  $A^\dagger$  sind für ein 2-Niveau-System wie z. B. ein Spin die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren (siehe nächster Abschnitt).



# 6. Mastergleichung vs Schrödinger-Dynamik

In Kapitel 3 wurde ein thermisches Relaxationsverhalten einfacher Spinsysteme unter reiner Schrödinger-Dynamik gezeigt. Der Mastergleichungsansatz für offene Systeme ist der herkömmliche Weg, um solches Verhalten phänomenologisch zu beschreiben. Hier sollen die asymptotischen Lösungen beider Methoden miteinander verglichen werden.

## 6.1. 2-Spinsystem gekoppelt an ein Bad

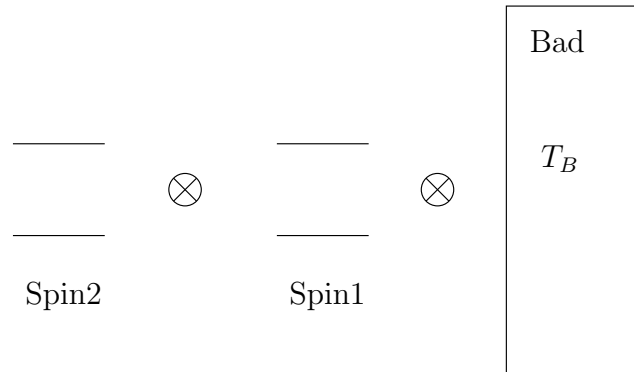


Abbildung 6.1.: 2 Spins an ein Bad gekoppelt

Zwei untereinander zufällig gekoppelte Spins werden über Spin (1) an ein Bad gekoppelt, welches durch eine Mastergleichung beschrieben wird. Abbildung 6.1 illustriert das zu beschreibende System. Der Hamilton-Operator des Spinsystems lautet

$$\hat{H}_S = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \lambda \cdot \hat{H}'_{\text{int}}. \quad (6.1)$$

$\hat{H}_{1(2)}$  ist der jeweilig lokale Spin-Hamilton-Operator in der Form

$$\hat{H}_{1(2)} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \quad (6.2)$$

## 6. Mastergleichung vs Schrödinger-Dynamik

und  $\hat{H}'_{\text{int}}$  der normierte Wechselwirkungs-Operator, gegeben durch

$$\hat{H}'_{\text{int}} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 p_{ij} \cdot \hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j. \quad (6.3)$$

Es gilt  $p_{ij} = p_{ji}$ .  $\lambda$  ist der Parameter, mit dem die Kopplungsstärke variiert werden kann, da  $\hat{H}'_{\text{int}}$  wieder wie in Kapitel 3.1.3 beschrieben normiert wurde. Die Dynamik des Systems wird beschrieben durch

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i [\hat{H}_S, \hat{\rho}] + \mathcal{D}(\hat{\rho}) \quad (6.4)$$

mit dem Dissipationsterm  $\mathcal{D}(\rho)$

$$\mathcal{D}(\rho) = -(\hat{A}\hat{\Gamma}^1\hat{\rho}) - (\hat{\Gamma}^1\hat{\rho}\hat{A}) + (\hat{\rho}\hat{\Gamma}^2\hat{A}) - (\hat{A}\hat{\rho}\hat{\Gamma}^2) \quad (6.5)$$

Die beiden Operatoren  $\hat{\Gamma}^1$  und  $\hat{\Gamma}^2$  sind als Übergangsmatrizen zu betrachten. Durch sie relaxiert das System in einen Gleichgewichtszustand.  $\hat{\Gamma}^1$  und  $\hat{\Gamma}^2$  berechnet sich aus allen Frequenzen  $\omega$ , die  $\hat{H}_S$  enthält, wie folgt

$$\Gamma_{ij}^1 = \kappa \cdot \frac{1}{e^{\omega_{ij}\beta_B} - 1} \cdot A_{ij} \quad \text{für} \quad \omega_{ij} > 0 \quad (6.6)$$

$$\Gamma_{ij}^1 = \kappa \cdot \frac{e^{\omega_{ij}\beta_B}}{e^{\omega_{ij}\beta_B} - 1} \cdot A_{ij} \quad \text{für} \quad \omega_{ij} < 0 \quad (6.7)$$

$$\Gamma_{ij}^2 = \kappa \cdot \frac{e^{\omega_{ij}\beta_B}}{e^{\omega_{ij}\beta_B} - 1} \cdot A_{ij} \quad \text{für} \quad \omega_{ij} > 0 \quad (6.8)$$

$$\Gamma_{ij}^2 = \kappa \cdot \frac{1}{e^{\omega_{ij}\beta_B} - 1} \cdot A_{ij} \quad \text{für} \quad \omega_{ij} < 0 \quad (6.9)$$

Die Komponenten des Operators  $\hat{A}$  lauten

$$\hat{A}_{ij} = \langle i | [\hat{1}(2) \otimes \hat{\sigma}_x(1)] | j \rangle \quad (6.10)$$

in der Eigenbasis des Spinsystem-Hamiltonoperators  $\hat{H}_S$ .  $\beta_B$  ist die inverse Temperatur des Bades und  $\kappa$  die Badkopplungskonstante.

### 6.1.1. Numerische Ergebnisse

Zum Vergleich des asymptotischen Verhaltens der Schrödinger-Dynamik unter thermischen Bedingungen (wie in Kapitel 2-3 beschrieben) mit der Dynamik der Mastergleichung eines zwei Spinsystems, werden zunächst die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Spin-Eigensystem mit Gleichung 2.44 berechnet. Für die Umgebungsankopplung und interne Kopplung werden die Werte  $\kappa = 0.001$ , bzw.  $\lambda = 0.2$  angenommen. Für die  $W^d(E_i)$ 's gilt dann nach Gleichung 2.44,  $W^d(E_0) = 0.427$ ,  $W^d(E_1) = 0.28$ ,  $W^d(E_2) = 0.201$  und  $W^d(E_3) = 0.092$ . Abbildung 6.2 zeigt den Relaxationsverlauf berechnet mit der Mastergleichung 6.4. Eingezeichnet sind als waagrechte Linien die Wahrscheinlichkeiten  $W^d(E_i)$  ermittelt mit Gleichung 2.44. Es ergibt sich asymptotisch eine exakte Übereinstimmung beider Ansätze.

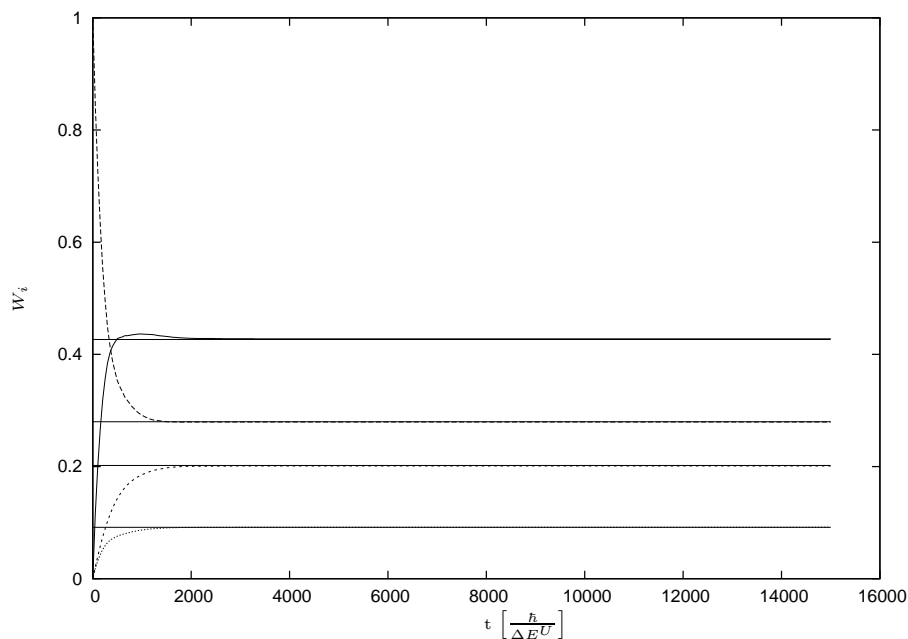


Abbildung 6.2.: Relaxationsverhalten eines 2-Spinsystems berechnet nach der Mastergleichung 6.4 und 6.5. Die waagrechten Linien sind die Wahrscheinlichkeiten  $W^d(E_i)$  berechnet mit Gleichung 2.44. Die durchgezogene Linie ist die Wahrscheinlichkeit  $W(E_0)$ , die gestrichelte für  $W(E_1)$ , die fein gestrichelte für  $W(E_2)$  und die gepunktete für  $W(E_3)$ .

## 6.2. Lokale und globale Temperatur

Wie in Kapitel 3 für die Schrödinger-Dynamik, werden nun für ein Spinsystem, bestehend aus zwei, bzw. drei Spins, die lokale Temperatur  $T_{\text{lok}}^n$  der einzelnen Spins  $n$  sowie die globale spektrale Temperatur  $T_{\text{spec}}$  des gesamten Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda$  berechnet. Diese Temperaturen werden verglichen mit der vom Bad vorgegebenen Temperatur  $T_B$ .

### 6.2.1. 2-Spinsystem

Ausgangspunkt der Analyse ist der Mastergleichungsansatz aus Kapitel 5.1. Ein System, bestehend aus zwei Spins, koppelt an ein Bad (vgl. Abbildung 3.3). Die interne Spin-Spin-Kopplung setzt sich entweder aus einer zufälligen Wechselwirkung wie in Gleichung 6.3 aus Kapitel 6.1 oder einer Heisenberg-Kopplung der Form

$$\hat{H}_{\text{int}}^H = \sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i(1) \otimes \hat{\sigma}_i(2) \quad (6.11)$$

zusammen. Beide internen Wechselwirkungen sind wie in Kapitel 3.1.3 beschrieben normiert und können über den Parameter  $\lambda$  variiert werden. Die globale Temperatur (Spektraltemperatur)  $T_{\text{spec}}$  des Spinsystems wird wie in Kapitel 2.3.3 Gleichung 2.49 über die Wahrscheinlichkeiten  $W(E_i)$  berechnet. Für  $T_{\text{spec}}$  gilt:

$$T_{\text{spec}} := \sum_n \frac{1 - W_0}{W_n} \frac{E_n - E_0}{\ln(W_n - W_0)} = \frac{1}{k_B \cdot \beta_{\text{spec}}} \quad (6.12)$$

Die Bad-Temperatur beträgt wie in Kapitel 3:  $T_B = \frac{1}{\beta_B} = \frac{1}{\ln 2} = 1.44$ . Abbildung 6.3 zeigt die beiden lokalen Spin-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^1$  und  $T_{\text{lok}}^2$ , sowie die Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$  für eine zufällige Spin-Spin-Kopplung. In Abbildung 6.4 sind ebenfalls die lokale und globale Temperatur für ein Heisenberg gekoppeltes Spinsystem dargestellt. Die durchgezogene Kurve entspricht jeweils der globalen Spinsystem Temperatur (Spektraltemperatur)  $T_{\text{spec}}$ . Sie ist identisch mit der vom Bad vorgegebenen Temperatur  $T_B = 1.44$ . Die beiden lokalen Spin-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^1$  und  $T_{\text{lok}}^2$  sind identisch und zeigen einen deutlichen Anstieg bei zunehmender Spin-Spin-Kopplung, Ausdruck der zunehmenden Korrelationen zwischen beiden Spins. Abbildung 6.3 und 6.4 zeigen eine gute Übereinstimmung mit Abbildung 3.7 und 3.8, die beide mit einer Schrödinger-Dynamik simuliert wurden. Außerdem zeigen alle vier Abbildungen deutlich,

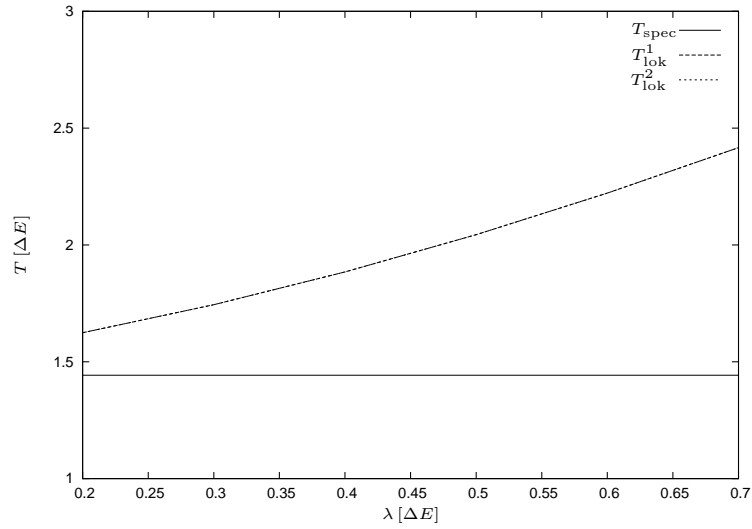


Abbildung 6.3.: Globale und lokale Temperatur eines 2-Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda$  für eine zufällige Wechselwirkung

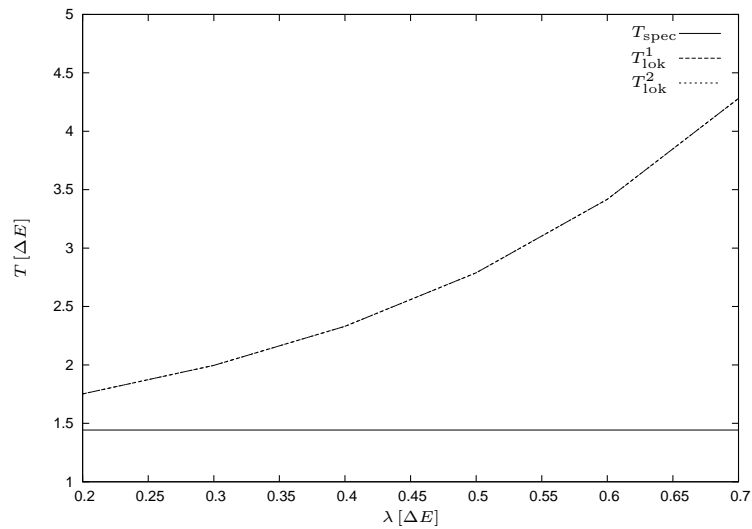


Abbildung 6.4.: Globale und lokale Temperatur eines 2-Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda$  für eine Heisenberg-Wechselwirkung

dass die Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$  des Spinsystems gut, bei der Mastergleichung sogar exakt, mit der “real“ vom Bad, bzw. Umgebung vorgegebenen Temperatur  $T_B$  übereinstimmt.

### 6.2.2. 3-Spinsystem

Wie in Kapitel 3 wird das Spinsystem um einen Spin auf drei Spins erweitert. Auch an diesem Spinsystem soll überprüft werden, ob die globalen und lokalen Temperaturen ähnliche Werte annehmen wie unter einer Schrödinger-Dynamik und mit der “realen“ Bad-Temperatur übereinstimmen. Die Bad-Temperatur wurde wieder auf  $T_B = 1.44$  eingestellt.

Der Spinsystem-Operator hat die Form

$$\hat{H}_S = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \lambda \cdot \hat{H}'_{\text{int}}. \quad (6.13)$$

Die interne Wechselwirkung  $\hat{H}'_{\text{int}}$  ist entweder zufällig (vgl. 6.11), oder eine Heisenberg-Kopplung (vgl. 6.12). Sie ist wieder normiert, weshalb die Kopplungsstärke wieder über den Parameter  $\lambda$  variiert werden kann. Für die Berechnung wurden die folgenden Parameter verwendet:  $\kappa = 0.001$  und  $T_B = 1.44$ .

Abbildung 6.5 zeigt die globale (Spektral-) Temperatur  $T_{\text{spec}}$  und die lokalen Spin-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^1$ ,  $T_{\text{lok}}^2$  und  $T_{\text{lok}}^3$  in Abhängigkeit von  $\lambda$  für eine zufällige Wechselwirkung, Abbildung 6.5 für ein Heisenberg gekoppeltes Spinsystem.

Beide Abbildungen sind in guter Übereinstimmung mit den Werten, welche durch eine SchrödingerDynamik ermittelt wurden (vgl. Abbilung 3.14 und 3.15). Die globale (Spektral-) Temperatur  $T_{\text{spec}}$  ist unabhängig von der internen Wechselwirkung und gleich der Bad-Temperatur  $T_B$ .

Das 3-Spin-System zeigt ebenfalls einen Anstieg der lokalen Spin-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^n$  bei zunehmender interner Wechselwirkungsstärke, unabhängig vom Kopplungstyp. Der mittlere Spin (2) zeigt eine höhere Temperatur als beide „Rand“-Spins (1) und (3) an. Dies ist eine Auswirkung der Korrelationen zwischen den einzelnen Spins. Spin (2) besitzt im Gegensatz zu Spin (1) und (3) zwei Korrelationspartner, weshalb sein Spektrum mehr gestört wird. Auch dieses Ergebnis ist in Einklang mit dem Ergebnis, welches die Schrödinger-Dynamik liefert.

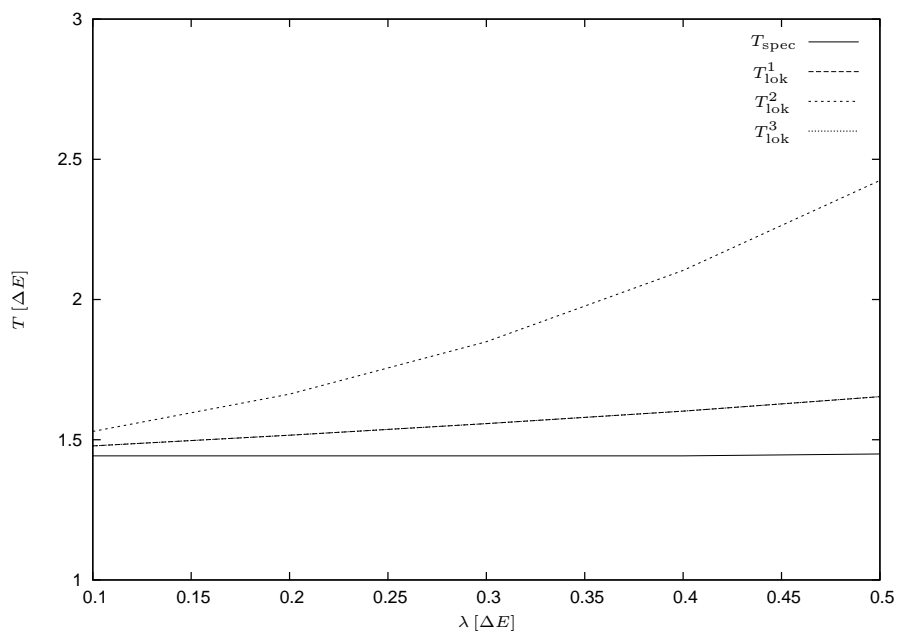


Abbildung 6.5.: Globale Temperatur  $T_{\text{spec}}$  und lokale Temperatur  $T_{\text{lok}}^n$  eines 3-Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda$  für eine zufällige Wechselwirkung

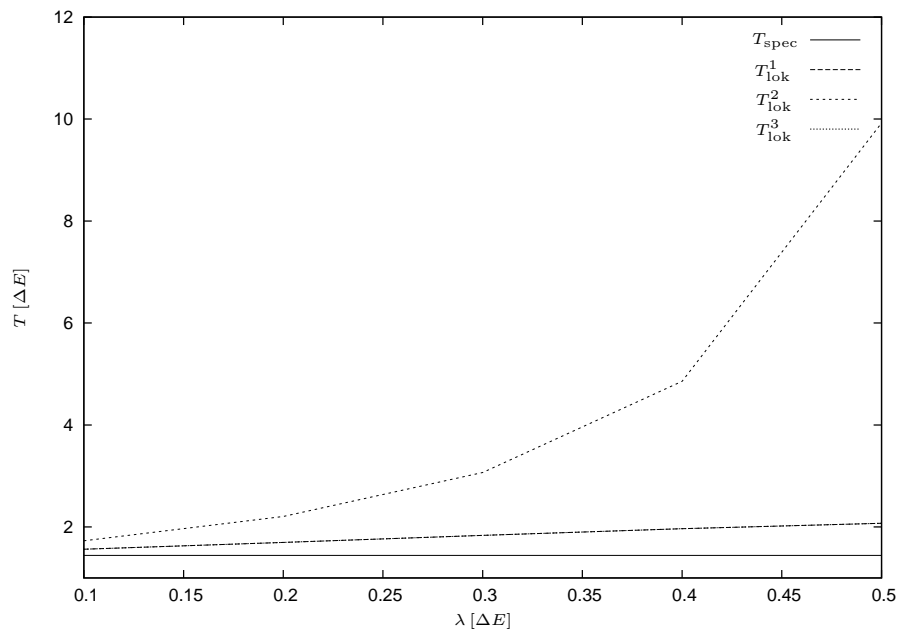


Abbildung 6.6.: Globale Temperatur  $T_{\text{spec}}$  und lokale Temperatur  $T_{\text{lok}}^n$  eines 3-Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda$  für eine Heisenberg-Wechselwirkung



# 7. Systeme jenseits des thermischen Gleichgewichts

Im Gegensatz zu allen vorangegangenen Untersuchungen werden in diesem Kapitel Systeme untersucht, die nicht im thermischen Gleichgewicht sind. Insbesondere werden Spin-Ketten mit einem Temperaturgefälle, erzeugt durch zwei Bäder mit unterschiedlichen Temperaturen, betrachtet.

## 7.1. Lokale und globale Temperatur

Befindet sich ein System, bestehend aus einer Spinkette mit nächster Nachbar-Wechselwirkung, global im thermischen Gleichgewicht, ist es nur bedingt möglich, von einer lokalen Temperatur einzelner Spingruppen oder eines Spins zu reden. Auf dieser Nanoskala ist noch nicht klar, was Temperatur eigentlich ist, bzw. was letzten Endes bei einer Temperaturmessung gemessen wird. Eine mögliche Bedingung für die Meßbarkeit der Temperatur auf einer Nanoskala ist die, dass sich das betrachtete Subsystem (eine Spingruppe) in einem kanonischen Zustand befinden muss. M. Hartmann zeigt in [4], dass sich eine Spingruppe in einem kanonischen Zustand befindet, wenn die Korrelationen zwischen den Spingruppen klein genug sind. Um diese Forderung zu erfüllen, müssen die Gruppen groß genug sein. Da die Gruppenenergie

$$E_G = n_S \cdot \bar{E}_S \tag{7.1}$$

proportional zur Anzahl  $n_S$  der einzelnen Spins in der Gruppe und der mittleren Spinenergie  $\bar{E}_S$  ist, wächst sie mit zunehmendem  $n_S$  stärker als die Wechselwirkung  $I_G$  zwischen den Spingruppen. Die Wechselwirkungsenergie

$$I_G = \text{const}, \tag{7.2}$$

ist bei kurzreichweitigen Kräften (z. B. nächster Nachbar-Wechselwirkungen vgl. Gleichung 3.18 und 3.19) unabhängig von  $n_S$ , weshalb bei entsprechend großem  $n_S$ ,  $I_G$  wesentlich kleiner ist als  $E_G$  (Oberflächen-Effekt). Dadurch ist die Spingruppe in einem kanonischen Zustand [20].

Für Systeme, die global nicht im thermischen Gleichgewicht sind, wird vermutet [21], dass sich lokal ein kanonischer Zustand einstellen kann, wenn für den Temperaturgradient

$$\frac{\delta T}{T} \ll 1 \quad (7.3)$$

gilt. Dies soll hier analysiert werden. Dazu wird zunächst das thermische Verhalten einer Spinkette zwischen zwei Bädern mit unterschiedlichen Temperaturen betrachtet.

### 7.1.1. Spinsystem zwischen zwei Bädern

Die Mastergleichung für ein System zwischen zwei Bädern lautet (vgl. 6.4 - 6.10)

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i [\hat{H}_s, \hat{\rho}] + \mathcal{D}_{B_1}(\hat{\rho}) + \mathcal{D}_{B_2}(\hat{\rho}) \quad (7.4)$$

mit den Dissipationstermen  $\mathcal{D}_{B_i}(\rho)$  (für  $i = 1, 2$ )

$$\mathcal{D}_{B_i}(\rho) = -(\hat{A}\hat{\Gamma}_{B_i}^1\hat{\rho}) - (\hat{\Gamma}_{B_i}^1\hat{\rho}\hat{A}) + (\hat{\rho}\hat{\Gamma}_{B_i}^2\hat{A}) - (\hat{A}\hat{\rho}\hat{\Gamma}_{B_i}^2) \quad (7.5)$$

Wird ein Spinsystem, bestehend aus drei Heisenberg<sup>4</sup> gekoppelten Spins, zwischen zwei Wärmebädern mit den Temperaturen  $T_{B_1} = \frac{1}{\beta_1} = 5$  und  $T_{B_2} = \frac{1}{\beta_2} = 3.33$  gekoppelt (Kopplungsstärke  $\kappa_1 = \kappa_2 = 0.001$  und  $\lambda_{SS} = 0.01$ ), erhält man ein Temperaturprofil wie in Abbildung 7.1 (siehe auch [22]).

Es stellt sich ein Temperaturgefälle ein, welches mit der Wärmeleitung (vgl. Fourier-Gesetz [23] und [24]) in Einklang steht. Erhöht man aber die Spin-Spin-Wechselwirkungsstärke  $\lambda_{SS}$ , so erhält man für z. B.  $\lambda_{SS} = 0.5$  kein Temperaturgefälle mehr. In Abbildung 7.2 ist zu erkennen, dass sich beim mittleren Spin (2) wie schon in vorangehenden Untersuchungen, aufgrund von Korrelationen mit Spin (1) und (3), die lokale Entropie erhöht. Dies führt zu einer Erhöhung der lokalen Temperatur  $T_{\text{lok}}^2$ .

---

<sup>4</sup>Die Analysen in Kapitel 7 beschränken sich auf Heisenberg gekoppelte Systeme, da diese Kopplung einen guten Energieaustausch garantiert und qualitativ kein Unterschied zu einer zufälligen Kopplung besteht, wie in den vorgehenden Kapiteln zu sehen ist.

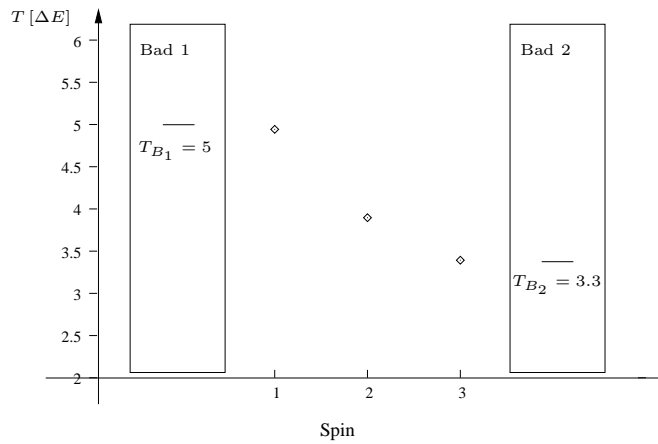


Abbildung 7.1.: Temperaturprofil für zwei Bäder und drei Spins mit einer internen Kopplungsstärke von  $\lambda_{SS} = 0.01$

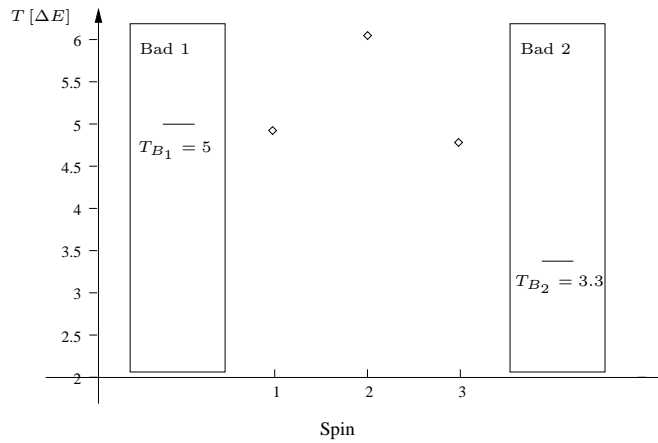


Abbildung 7.2.: Temperaturprofil für zwei Bäder und drei Spins mit einer internen Kopplungsstärke von  $\lambda_{SS} = 0.5$

### 7.1.2. Zur Temperaturmessung an einer Spinkette

Dieser Abschnitt behandelt ein Modell zur Temperaturmessung, aufbauend auf den Untersuchungen von Kapitel 7.1.1. Abbildung 7.3 zeigt das zur Analyse verwendete Modell. Eine Spinkette, bestehend aus drei Heisenberg gekoppelten

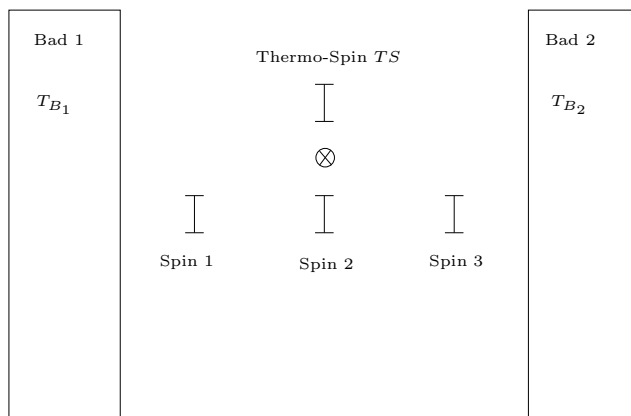


Abbildung 7.3.: Modell zur Temperaturmessung am 3-Spinsystem

Spins, wird zwischen zwei Wärmebäder gekoppelt. Ein zusätzlicher Spin, hier Thermo-Spin  $TS$  genannt, wird als „Thermometer“ an Spin  $n$  ( $n = 1, 2, 3$ ) gekoppelt. Untersucht wird, unter welchen Bedingungen der als Thermometer fungierende Thermo-Spin  $TS$  die lokale Spin-Temperatur  $T_{\text{lok}}^n$  bzw. die globale Spektraltemperatur  $T_{\text{spec}}$  der drei Spins annimmt.

#### Variation der Kopplungsstärke zwischen Thermometer und Spinsystem

Zunächst wird die Thermo-Spin Wechselwirkungsstärke  $\lambda_{TS}$  variiert, während die Spin-Spin-Wechselwirkung  $\lambda_{SS} = 0.1$  konstant gehalten wird. In den Abbildungen 7.4 bis 7.6 sind die Temperaturen in Abhängigkeit von  $\lambda_{TS}$  dargestellt. Die gestrichelten waagrechten Linie verdeutlichen die lokalen Temperaturen, welche die Spins ohne den Thermo-Spin annehmen würden bei  $T_{B_1} = 4$  und  $T_{B_2} = 3.33$  (vgl. Abbildung 7.1).

Bei einer schwachen Ankopplung des Thermo-Spins an eines der Kettenglieder bleiben die lokalen Spin-Temperaturen identisch mit denen ohne Thermo-Spin. Erhöht man aber  $\lambda_{TS}$ , steigt die lokale Entropie des Spins und somit auch die lokale Temperatur, an welchen der Thermo-Spin koppelt, aufgrund der sich bildenden Korrelationen zwischen Thermo-Spin und Kopplungspartner, an. Der Thermo-Spin erreicht in etwa die Temperatur seines Kopplungspartners.

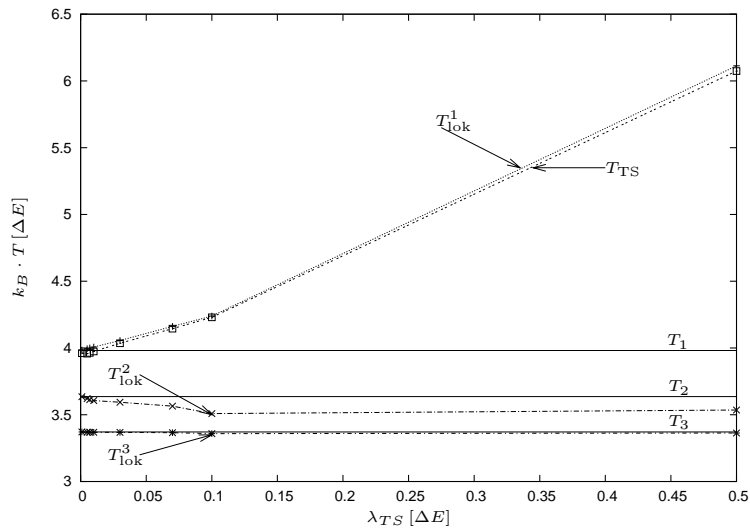


Abbildung 7.4.: Temperaturverlauf der lokalen Temperaturen für Spin (1)  $T^1_{lok}$ , Spin (2)  $T^2_{lok}$ , Spin (3)  $T^3_{lok}$  und des Thermo-Spins  $T_{TS}$  in Abhängigkeit von  $\lambda_{TS}$  bei Ankopplung des Thermo-Spins an Spin (1). Waagrecht sind die lokalen Spin-Temperaturen  $T_n$  eingezeichnet ohne TS.

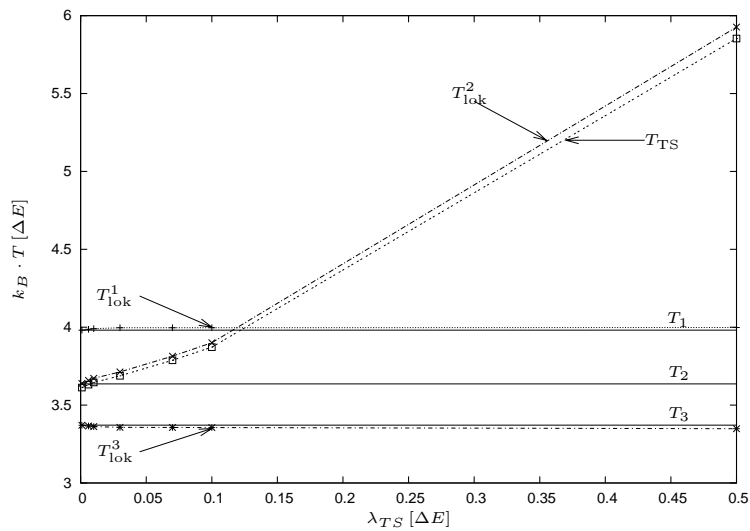


Abbildung 7.5.: Temperaturverlauf für Spin (1)  $T^1_{lok}$ , Spin (2)  $T^2_{lok}$ , Spin (3)  $T^3_{lok}$  und des Thermo-Spins  $T_{TS}$  in Abhängigkeit von  $\lambda_{TS}$  bei Ankopplung des Thermo-Spins an Spin (2). Waagrecht sind die Spin-Temperaturen  $T_n$  eingezeichnet ohne TS.

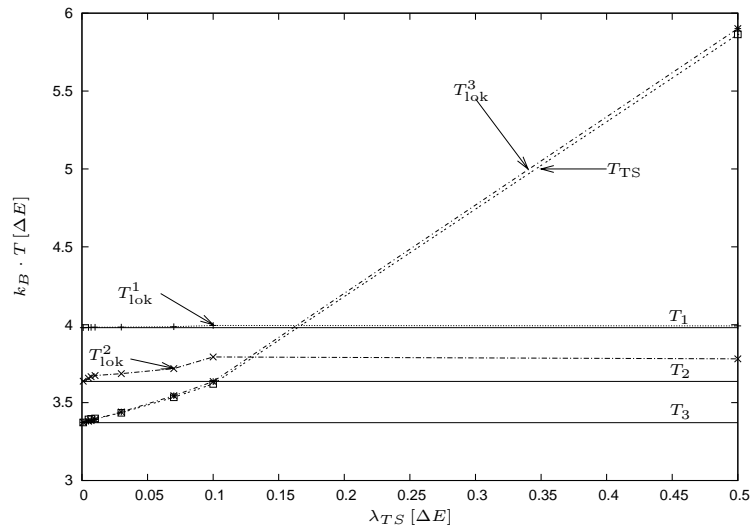


Abbildung 7.6.: Temperaturverlauf für Spin (1)  $T^1_{lok}$ , Spin (2)  $T^2_{lok}$ , Spin (3)  $T^3_{lok}$  und des Thermo-Spins  $T_{TS}$  in Abhängigkeit von  $\lambda_{TS}$  bei Ankopplung des Thermo-Spins an Spin (3). Waagrecht sind die Spin-Temperaturen  $T_n$  eingezeichnet ohne TS.

In Abbildung 7.5 ist der Thermo-Spin an den mittleren Spin der Kette gekoppelt. Man erkennt dort mit zunehmendem  $\lambda_{TS}$  eine kleine Störung der lokalen Temperaturen von Spin (1) und (3). Koppelt der Thermo-Spin an den Rand der Kette (Spin (1) oder (3)), erkennt man in Abbildung 7.4 und 7.6 eine größere Abweichung der Temperatur des mittleren Spins (2). Diese Abweichung entsteht vermutlich dadurch, dass die Symmetrie der Kette durch den Thermo-Spin gebrochen wird. Die Energie des mittleren Spins wird somit erhöht, bzw. erniedrigt.

### Variation der Spin-Spin-Kopplungsstärke

Die Kopplungsstärke  $\lambda_{TS} = 0.01$  wird konstant gehalten, während die interne Spin-Spin-Wechselwirkung  $\lambda_{SS}$  variiert wird. Der Thermo-Spin koppelt an den mittleren Spin (2) der Kette, um Randeffekte auszuschließen. Abbildung 7.7 zeigt die Temperatur des Thermo-Spins (durchgezogene Kurve), sowie die lokalen Temperaturen von Spin (1) (gestrichelte Kurve), Spin (2) (gepunktete Kurve) und Spin (3) (fein gepunktete Kurve) in Abhängigkeit von  $\lambda_{SS}$ . Es ist deutlich zu erkennen, dass die Temperatur des Thermo-Spins von der lokalen Temperatur des Spin (2) mit zunehmender Spin-Spin-Kopplung abweicht. Dieses Ergebnis ist in guter Übereinstimmung mit der Forderung, dass die interne

Wechselwirkungsenergie klein sein muss, damit eine lokale Temperatur noch gemessen werden kann.

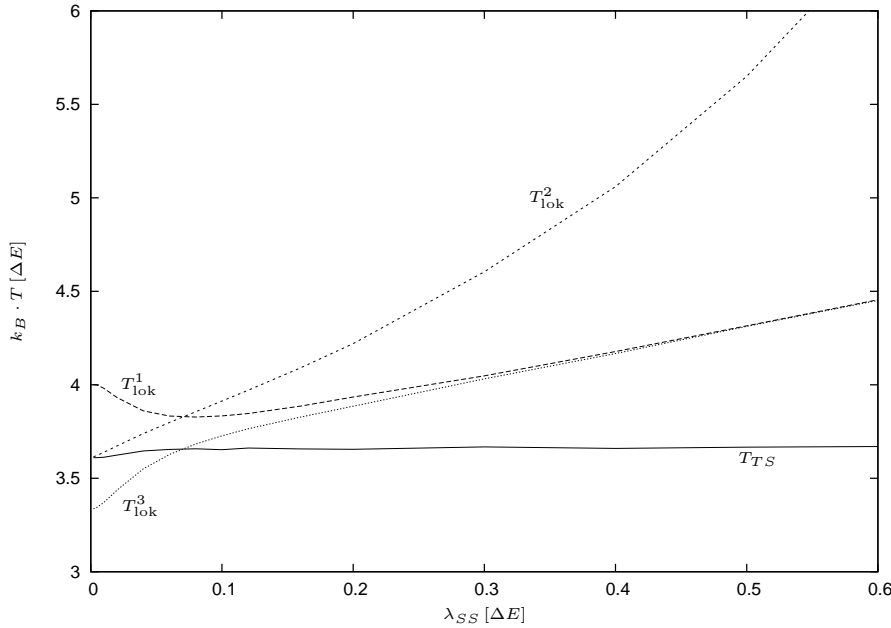


Abbildung 7.7.: Temperaturverlauf der lokalen Spin-Temperaturen  $T_{\text{lok}}^n$  und des Thermo-Spins TS in Abhängigkeit von  $\lambda_{SS}$ .

Um zu analysieren, ob es möglich ist, dass der Thermo-Spin TS die Temperatur von Teilen der Spinkette annimmt, wurden die Spins (1) und (2), sowie (2) und (3) als Spin-Gruppen betrachtet. In Abbildung 7.8 ist der Temperaturverlauf des Thermo-Spins (durchgezogene Kurve), sowie die globale Spektraltemperatur des Spinsystems (gestrichelte Kurve) und die Spektraltemperaturen für die beiden Spinpaare (1)+(2) (gepunktet), bzw. (2)+(3) (fein gepunktet) in Abhängigkeit von  $\lambda_{SS}$  aufgetragen.

Der Thermo-Spin erreicht im betrachteten Parameterfenster ( $\lambda_{SS} = 0.001 - \lambda_{SS} = 0.6$ ) die globale Temperatur (Spektraltemperatur) des Spinsystems und nicht die Spektraltemperatur der beiden Spinpakete. Die dargestellten Abweichungen der globalen Temperatur  $T_{\text{spec}}$  von der Thermo-Spin Temperatur  $T_{\text{TS}}$  haben ihren Ursprung in Schwankungen der Spektraltemperaturkomponenten  $b_i$  (vgl. Gleichung 2.50) des Spinsystems. In Abbildung 7.9 sind die einzelnen Spektraltemperaturkomponenten geplottet.

Für  $\lambda_{SS} = 0.001, 0.2$  und  $\lambda_{SS} = 0.4$  ist eine deutliche Auffächerung der Komponenten zu erkennen, die in Einklang mit den Temperaturabweichungen

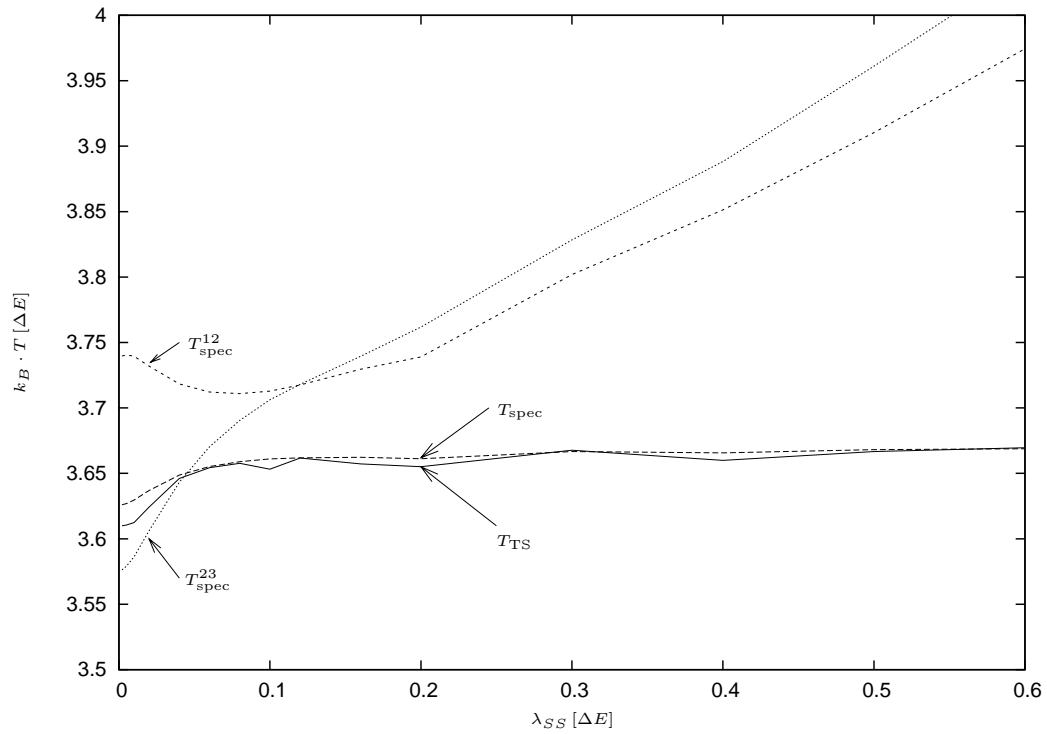


Abbildung 7.8.: Temperaturverlauf des Thermospins  $T_{\text{TS}}$ , der globalen (Spektral-) Temperatur  $T_{\text{spec}}$  und der „Paket“-Temperaturen von Spin (1)+(2)  $T_{\text{spec}}^{12}$  sowie von Spin (2)+(3)  $T_{\text{spec}}^{23}$  in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$



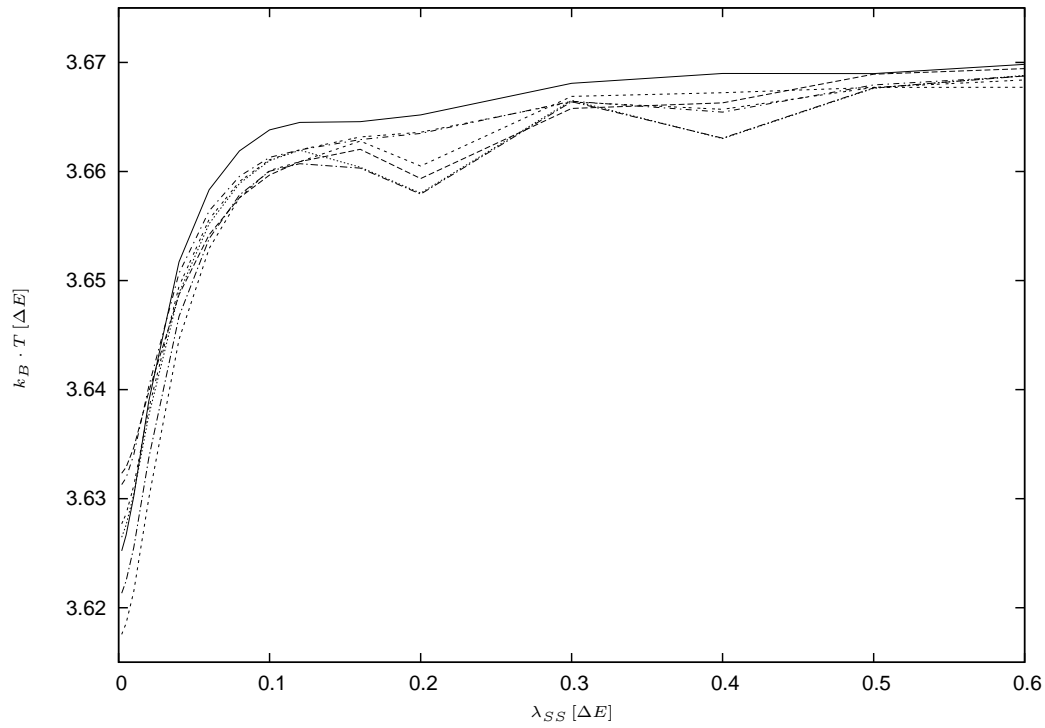


Abbildung 7.9.: Verlauf und Auffächerung der einzelnen Komponenten  $T_{\text{spec}}^i = \frac{1}{k_B \cdot b_i}$  der Spektraltemperatur des 3-Spinsystems in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$

von der Thermo-Spin-Temperatur ist. Diese Verteilungen zeigen, dass der Zustand nicht mehr streng kanonisch ist. Dies ist ein Hinweis auf die theoretische Überlegung (vgl. [25]), dass eine lokale Temperatur nur dann gemessen werden kann, wenn das betrachtete Subsystem (z. B. zwei oder drei Spins) kanonisch verteilt ist. In Abbildung 7.10 sind die Komponenten der Spektraltemperatur  $T_{\text{lok}}^{12}$  des Spin-Pakets, bestehend aus Spin (1) und (2), dargestellt. Eine deutliche Auffächerung von Beginn an zeigt, dass das Spin-Paket keine kanonische Verteilung besitzt, weshalb der Thermo-Spin nicht die Temperatur des Pakets messen kann. Abbildung 7.11 zeigt die Komponenten der Spektraltempera-

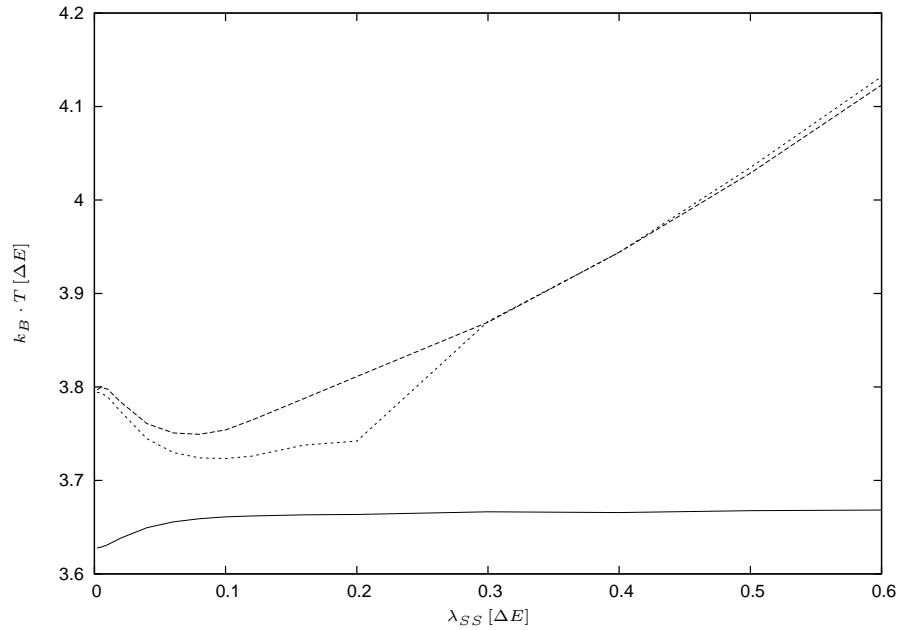


Abbildung 7.10.: Verlauf und Auffächerung der einzelnen Komponenten der Spektraltemperatur  $T_{\text{lok}}^{12}$  des zwei Spin-Pakets von Spin (1) und (2) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$

tur  $T_{\text{lok}}^{23}$  für das Spin-Paket Spin (2) und (3). Auch hier ist zu sehen, dass die Verteilung nicht kanonisch ist.

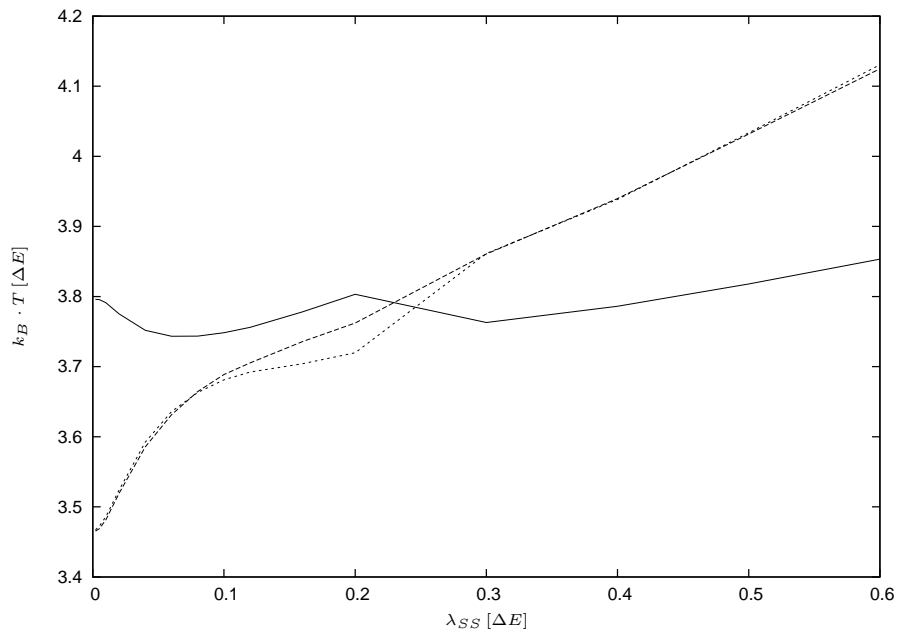


Abbildung 7.11.: Verlauf und Auffächerung der einzelnen Komponenten der Spektraltemperatur  $T_{\text{lok}}^{23}$  des zwei Spin-Pakets von Spin (2) und (3) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$

### Spingruppen im kanonischen Zustand

Die Untersuchungen an einer Spinkette, bestehend aus drei Spins, haben gezeigt, dass es für diese nicht möglich ist Spingruppen (bestehend aus zwei Spins) zu finden, welche in einem kanonischen Zustand sind. Deshalb wurde die Spinkette auf vier Spins erweitert und der Temperaturgradient erniedrigt. Die Badtemperaturen betragen nun  $T_{B_1} = 3.45$  und  $T_{B_2} = 3.33$  (in  $\Delta E$ ). Auf ein Thermometer-Spin wurde aufgrund der begrenzten Rechenleistung verzichtet. Es soll nun analysiert werden, ob sich einzelne Gruppen, bestehend aus zwei oder drei Spins, in einem kanonischen Zustand befinden. Abbildung 7.12 zeigt die Komponenten der Spektraltemperatur der gesamten Spinkette. Abbildung 7.13 und 7.14 zeigen die Komponenten der Spektraltemperatur für eine Spingruppe, bestehend aus drei Spins. In Abbildung 7.15, 7.16 und 7.17 sind schließlich die Komponenten der Spektraltemperatur der Spingruppen, bestehend aus zwei Spins dargestellt.

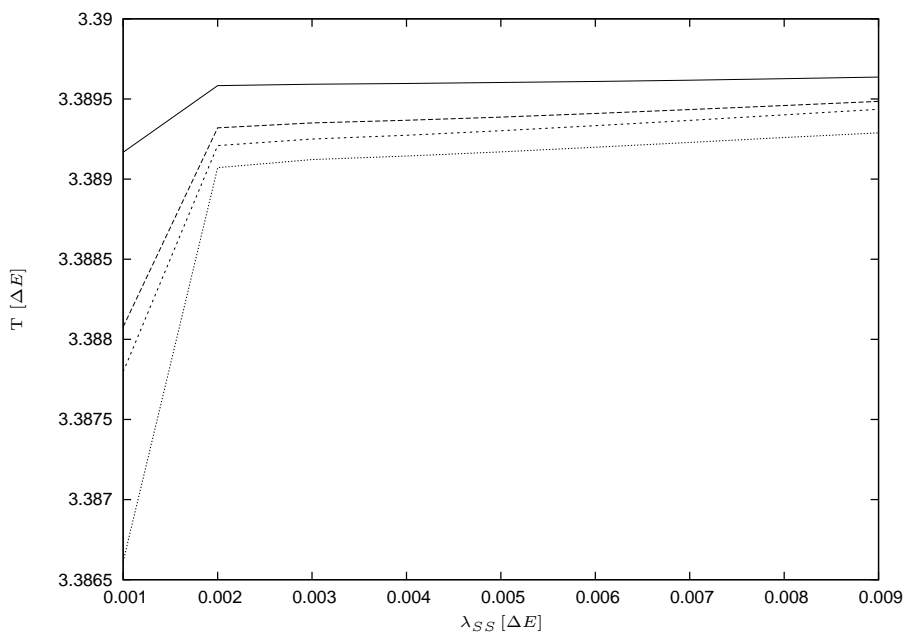


Abbildung 7.12.: Auffächerung der Komponenten der Spektraltemperatur der gesamten 4-Spinkette in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$ . Abgebildet sind die beiden Komponenten mit dem größten Abstand, sowie zwei Komponenten mit geringerem Abstand.

Die Aufspaltung der Spektraltemperatur für die 4-Spinkette, also der maximale Abstand der einzelnen Komponenten beträgt  $\Delta T_{\max}^{1234} \approx 2.55 \cdot 10^{-3}$  und

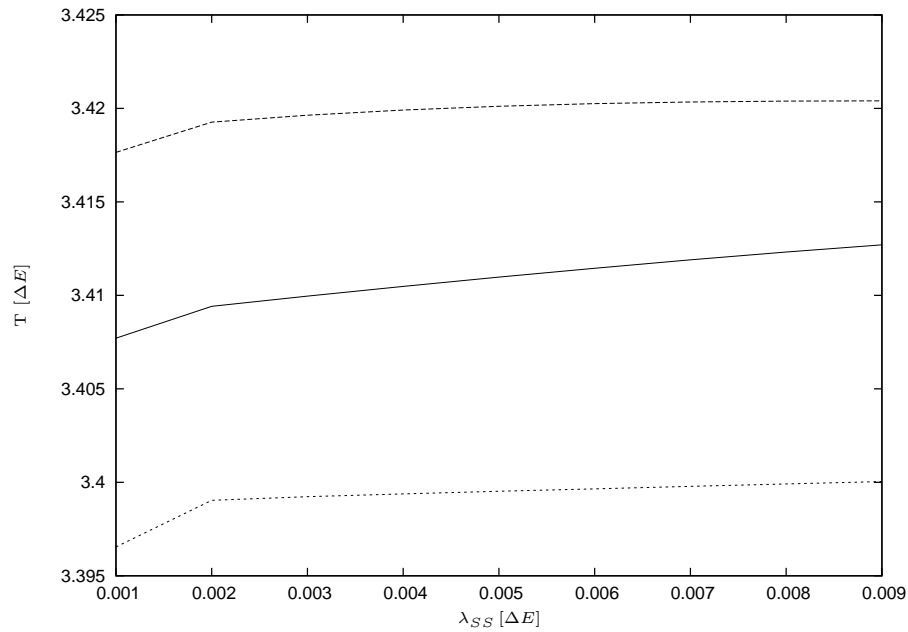


Abbildung 7.13.: Auffächerung der Spektraltemperatur der Spingruppe (1), (2) und (3) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$ . Abgebildet sind die beiden Komponenten mit dem größten Abstand und eine dazwischen liegende Komponente.

## 7. Systeme jenseits des thermischen Gleichgewichts

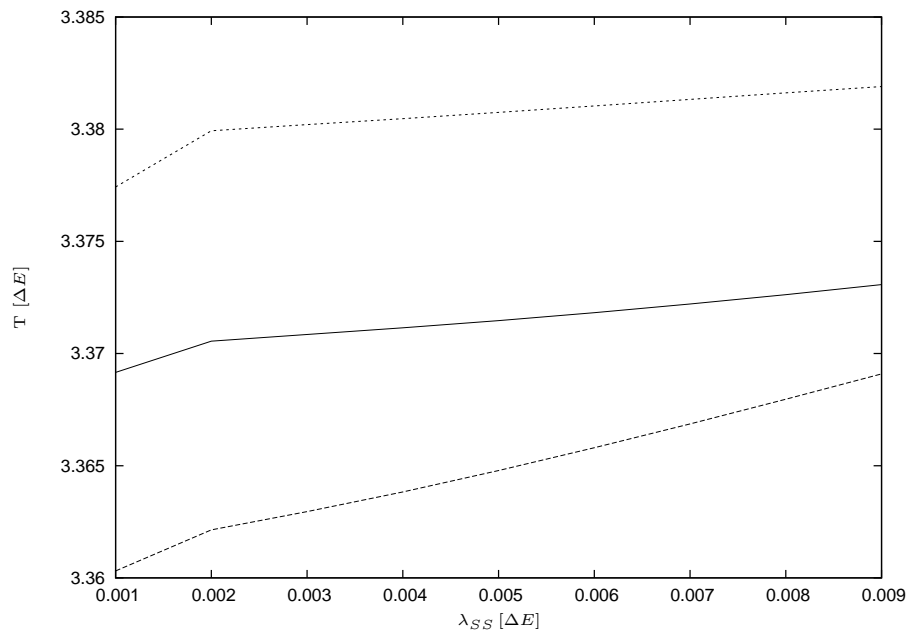


Abbildung 7.14.: Auffächerung der Spektraltemperatur der Spingruppe (2), (3) und (4). Abgebildet sind die beiden Komponenten mit dem größten Abstand und eine dazwischen liegende Komponente.

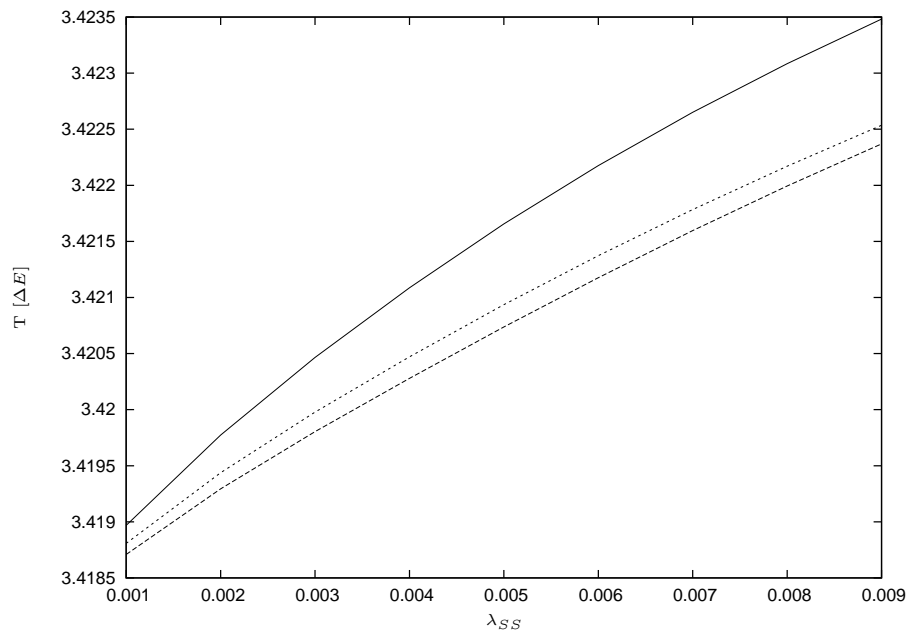


Abbildung 7.15.: Auffächerung der Spektraltemperatur der Spingruppe (1) und (2) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$ .

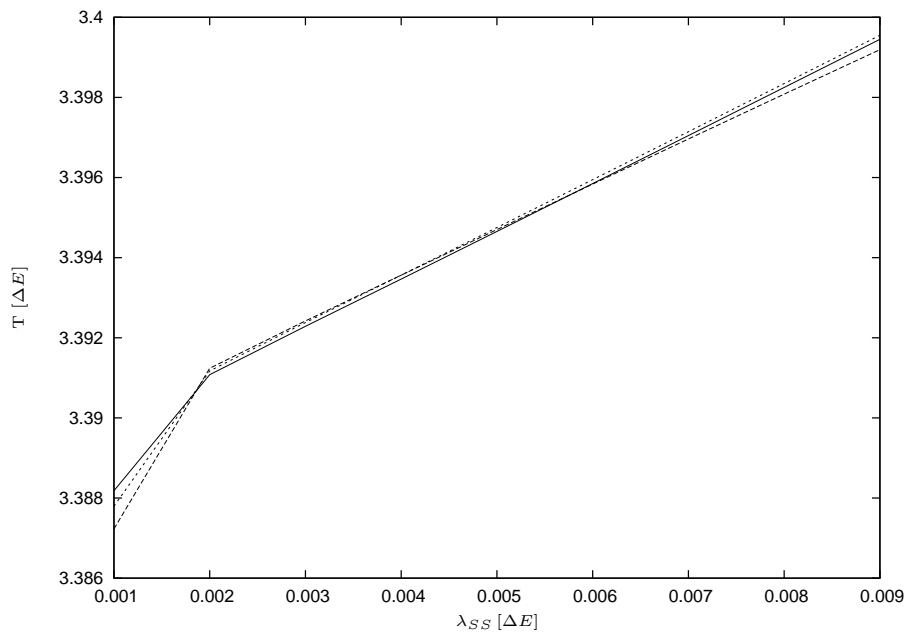


Abbildung 7.16.: Auffächerung der Spektraltemperatur der Spingruppe (2) und (3) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$ .

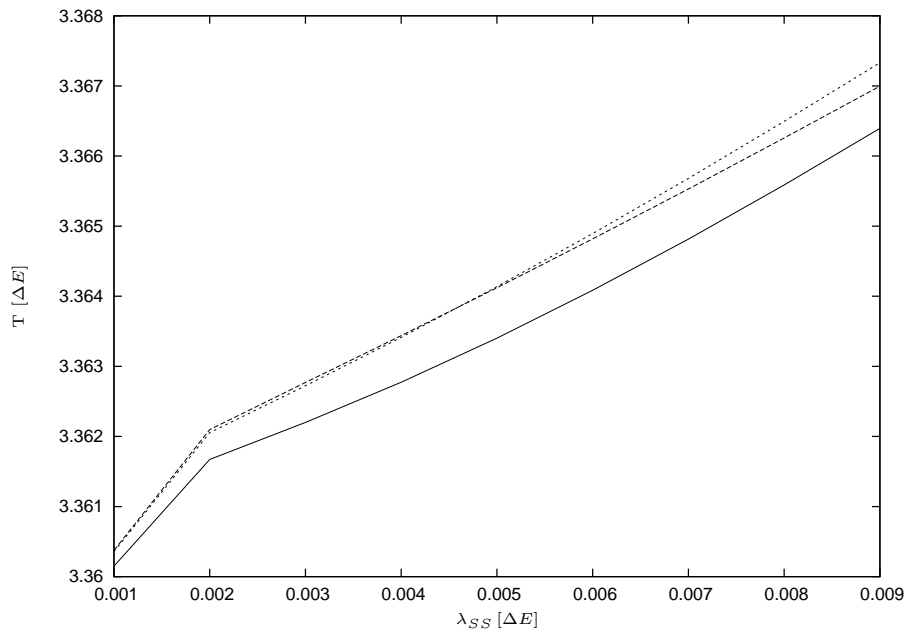


Abbildung 7.17.: Aufspaltung der Spektraltemperatur der Spingruppe (3) und (4) in Abhängigkeit der internen Kopplungsstärke  $\lambda_{SS}$ .

## 7. Systeme jenseits des thermischen Gleichgewichts

der minimale  $\Delta T_{\min}^{1234} \approx 0,5 \cdot 10^{-3}$ . Alle Abstände der einzelnen Spingruppen sind in Tabelle 7.1 eingetragen.

Gruppe	$\Delta T_{\text{spec}}^{\text{max}}$	$\Delta T_{\text{spec}}^{\text{min}}$
1234	$2.55 \cdot 10^{-3}$	$0,5 \cdot 10^{-3}$
123	$2 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$
234	$1.75 \cdot 10^{-2}$	$1.75 \cdot 10^{-2}$
12	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$0.22 \cdot 10^{-3}$
23	$0.95 \cdot 10^{-3}$	$0.16 \cdot 10^{-3}$
34	$0.94 \cdot 10^{-3}$	$0.2 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 7.1.: Maximale und minimale Aufspaltungen der Spektraltemperatur der gesamten Spinkette und einzelner Spingruppen. Die gesamte Spinkette besteht aus vier Spins mit Heisenbergkopplung.

Der Tabelle 7.1 ist zu entnehmen, dass die Spingruppen aus zwei Spins eine geringere Auffächerung der Spektraltemperatur aufweisen als Spingruppen aus drei Spins. Ihr Abstand ist in der Größenordnung gleich dem, für die gesamte Spinkette. Deshalb sollte es möglich sein, beim Anbringen eines Thermometer-Spins bei einer 2-Spingruppe, die lokale Gruppentemperatur zu “messen“.



## 8. Zusammenfassung

Demonstriert wurde in dieser Arbeit das thermische Verhalten von quantenmechanischen modularen Systemen unter Schrödinger-Dynamik. Dabei spielte es keine Rolle, dass nicht das gesamte System an die Umgebung ankoppelt. Für das thermische Verhalten scheint nur das Energiespektrum des Systems ausschlaggebend zu sein, wenn alle Subsysteme (Spins) mit einander wechselwirken und eine Umgebung vorhanden ist, die alle Übergänge im System ermöglicht. Solange die interne Wechselwirkung einen Energietransport ermöglicht, relaxiert das System in den vorhergesagten Gleichgewichtszustand, unabhängig von der internen Kopplungsstärke.

Lediglich die Wechselwirkung zwischen System und Umgebung muss schwach sein. Etliche Simulationen haben gezeigt, dass bei einer zu starken Kopplung die Umgebungsniveaus zu stark gestört werden, weshalb sich ein anderer, nicht vorherberechneter Gleichgewichtszustand einstellt. Die quantenmechanische Umgebung prägt bei schwacher Kopplung dem Spinsystem die Temperatur auf, die durch die exponentielle Entartungsstruktur der Umgebung zustande kommt. Für das Spinsystem kann eine Spektraltemperatur bestimmt werden, welche in guter Übereinstimmung mit der Umgebungstemperatur ist und somit zurecht als globale (System-) Temperatur bezeichnet wurde.

Die Untersuchung der lokalen Temperaturen der einzelnen Spins ergab eine deutliche Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke. Im Schwachkopplungsbereich waren die lokalen Spintemperaturen nahezu identisch mit der globalen Spektraltemperatur des gesamten Spinsystems und der eingepprägten Umgebungstemperatur. Mit zunehmender Kopplungsstärke zeigte sich eine deutliche Abweichung der lokalen Temperaturen von der globalen. Der Grund dafür ist in den zunehmenden Korrelationen der Spins untereinander zu sehen, was an dem mittleren Spin des 3-Spinsystems deutlich wurde.

Dies kann auch als Hinweis auf mögliche Probleme zur Messung von Temperaturen auf der Nanoskala gedeutet werden. Zu starke Korrelationen zwischen Thermometer und Probe können eine Messung beeinträchtigen, was die theoretische Modellmessung in Kapitel 7.1.2 auch gezeigt hat. Berücksichtigt man

eine schwache Kopplung des Thermometers an die Probe, zeigte sich auch, dass die Eigenschaft der Kanonizität einzelner Spinkettengruppen oder -glieder ausschlaggebend dafür sein kann, ob eine lokale Temperatur überhaupt existiert. Zum genaueren Studium dieser Vermutung wäre es notwendig, leistungsfähigere Rechner und Programme für die Numerik zu verwenden. Auch dies ist ein Gebiet, welches in Zukunft weitere interessante Ergebnisse liefern könnte.

Zum Vergleich wurden die Ergebnisse der Quantenthermodynamik aus Kapitel 3 durch den bekannten Ansatz mit Hilfe einer Mastergleichung bestätigt. Für die betrachteten Systeme sind beide Zugänge äquivalent, wenn man den thermischen Gleichgewichtszustand bestimmen möchte. Zu untersuchen bleibt, in wie weit beide Zugänge ähnliches Kurzzeitverhalten zeigen, sprich der Weg ins Gleichgewicht identisch ist. Darüber hinaus sollte es möglich sein, durch Vergleich mit der "exakten" Schrödinger Relaxation Abweichungen vom Markov-Verhalten zu testen. Allerdings setzt die Thermodynamik eine schwache Kopplung voraus.

Thermische Fluktuationen werden üblicherweise im Rahmen der klassischen statistischen Thermodynamik behandelt. Auch hier zeigte die Analyse der Spektraltemperatur, dass Schwankungen auftreten. Überwiegend handelt es sich dabei um Schwankungen der Besetzungszahlen. Deutlich zu erkennen war, dass die Besetzungszahlschwankungen bei kleinen Umgebungen und somit niedrigdimensionaler Hilberträume größer waren. Die Analyse thermischer Fluktuationen im Rahmen der Quantenthermodynamik ist ein Gebiet, welches durchaus noch weitere Untersuchungen erfordert.

# A. Numerische Methoden

Zur Erstellung der folgenden C++-Programme wurde die blitz++-Bibliothek [26] und die NAG C Bibliotheken [27] verwendet.

## A.1. Schrödinger-Dynamik

### A.1.1. Erzeugung der Spinsystem Operatoren

Ausgangspunkt für die Schrödinger-Dynamik-Simulationen war immer der System-Hamilton-Operator, bestehend aus zwei oder drei Spin-Operatoren (vgl. 3.1). Dieser Hamilton-Operator wurde mit dem Programm `Spin-Ham.cc` erzeugt. Die erhaltene Matrix wurde mit dem Programm `Eigensystem-HSpin.cc` diagonalisiert und die Eigenwerte und Eigenvektoren ausgegeben. Die Diagonalisierung wurde mit Hilfe der NAG C-Bibliotheken durchgeführt.

### A.1.2. Erzeugung der Umgebungs-Hamilton-Operatoren

Die Umgebungs-Hamilton-Operatoren wurden mit dem Programm `Bad-Ham.cc` erstellt. Damit Übergänge im Spinsystem möglich sind, wurde das Bad entsprechend dem Energiespektrum des Spinsystems justiert (siehe Abbildung A.1 für ein 2-Spinsystem). Dazu wurden die Eigenwerte des Spin-Hamilton-Operators eingelesen, die Energieabstände bestimmt und die Umgebung entsprechend angepaßt. Diese Justierung ist lediglich als technischer “Trick“ zu verstehen, durch welchen die Umgebung bei möglichst geringer Niveau-Zahl “optimiert“ werden soll. Das “reale“ physikalische Bad mag im gesamten Energiebereich ein Quasi-Kontinuum von Zuständen enthalten, von denen im wesentlichen aber nur die hier angegebenen Niveaus “mitspielen“ würden.

Alle Zustände können im Spinsystem erreicht werden, wenn der Anfangszustand ein Produktzustand der Form

$$\psi_{ges}(t_0) = \psi_S(t_0) \otimes \psi_B(t_0), \quad (\text{A.1})$$

mit dem System-Zustand (für  $n$  Spins)

$$\psi_S(t_0) = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}_1 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \end{pmatrix}_n \quad (\text{A.2})$$

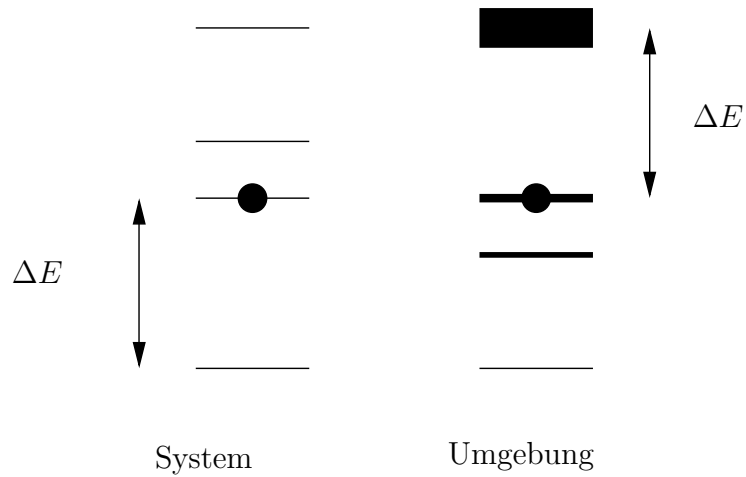


Abbildung A.1.: Darstellung der Energieübergänge im System und Umgebung. Die Dicke der Energieniveaus stellt den Entartungsgrad dar.

und dem Bad-Zustand

$$\psi_B(t_0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

ist. Der Startzustand muss so gewählt werden, dass von Beginn an Übergänge möglich sind. Es darf nicht am Rand des Spektrums, also nicht im Spinsystem und der Umgebung ganz unten, bzw. ganz oben, gestartet werden. Wie in Abbildung A.1, soll jeweils ein Niveau im System und Umgebung besetzt sein. Dieses Umgebungsdesign mag sehr speziell wirken, erfüllt aber bei schwacher Kopplung zwischen Spinsystem und Umgebung, Bedingungen, welche ein Wärmebad besitzen sollte. Der berechnete Anfangszustand wurde gespeichert und später vom Programm `SDyn.cc` eingelesen. Der so erhalten Bad-Operator wurde mit dem Programm `Eigensystem-Hges.cc` (verwendet ebenfalls die `NagC-Libraries`) diagonalisiert. Die erhaltenen Eigenwerte und Eigenvektoren wurden in Dateien gesichert.

### A.1.3. Schrödinger-Dynamik

Die Schrödinger-Dynamik wurde mit dem Programm `SDyn.cc` durchgeführt. Die Eigenwerte und Eigenvektoren des Spinsystem-Hamilton-Operators sowie die des Gesamt-Hamilton-Operators werden eingelesen. Der mit dem Programm `Bad-Ham.cc` erzeugte Anfangszustand wird eingelesen und in die Spinsystem-Eigenbasis transformiert. Danach wird die Schrödingergleichung 2.1 des gesamten Hamilton-Operator zu jedem Zeitschritt gelöst, die entsprechenden reduzierten Zustände des Spinsystems und nach Rücktransformation in die Produktbasis die einzelnen Spins ausgespurt. Die so erhaltenen Ergebnisse wurden abgespeichert.

### A.1.4. Temperaturberechnung

Zur Berechnung der lokalen Temperatur wurde das Programm `analyse.cc` benutzt. Die reduzierte Dichtematrix des Spinsystems wurde zu jedem simulierten Zeitpunkt eingelesen und anschließend zeitlich gemittelt. Die Spektraltemperatur des Spinsystems wurde mit Gleichung 2.49 berechnet. Nach dem mit Hilfe der Eigenvektoren des Spinsystems der Zustand in die Produktbasis transformiert wurde, konnte die lokale Temperatur und die Korrelationen der einzelnen Spins ermittelt werden. Die Temperaturen wurden in die Datei `Temperatur.dat`, die Korrelationen in die Datei `Mass.dat` gespeichert.

## A.2. Mastergleichung

Zur Simulation der Mastergleichung wurde das Programm Mathematica verwendet. Gelöst wurde die entsprechende Mastergleichung mit Hilfe einer Routine zur Lösung von Differenzialgleichung. Die reduzierten Systeme zur Berechnung der globalen und lokalen Temperatur wurden ausgespurt. Die Ergebnisse wurden gespeichert und mit Hilfe des Programms `gnuplot` dargestellt.



# Literaturverzeichnis

- [1] L. Boltzmann. Über die mechanische Bedeutung des zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie. *Wien. Ber.* 53, 159, 1896.
- [2] J. W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. Dover Publications, New York, 1960.
- [3] J. Gemmer. *A quantum approach to thermodynamics*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 2003.
- [4] M. Hartmann, G. Mahler, and O. Hess. Existence of Temperature on the Nanoscale. *Physical Review Letters*, 93(8), 4 August 2004.
- [5] J. Gemmer, M. Michel, and G. Mahler. *Quantum Thermodynamics - Emergence of Thermodynamic Behavior within Composite Quantum Systems*. Springer LNP, Berlin, New York, 2004. in press.
- [6] L. B. Ballentine. *Quantum Mechanics*. World Scientific, Singapore, 2. edition, 1998.
- [7] G. Mahler and V.A. Weberruß. *Quantum Networks*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2. edition, 1998.
- [8] J. Gemmer and G. Mahler. Entanglement and the factorization-approximation. *Euro. Phys. J. D*, 17:385–393, 2001.
- [9] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.*, 47:777–780, 1935.
- [10] A. N. Jordan and M. Büttiker. Entanglement Energetics at Zero Temperature. *cond-mat/0311647*, 2003.
- [11] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

- [12] Franz Schwabl. *Statistische Mechanik*. Springer, 2000.
- [13] H. Tasaki. From Quantum Dynamics to the Canonical Distribution: General Picture and a Rigorous Example. *Phys. Rev. Lett.*, 80:1373–1376, 1998.
- [14] J. Gemmer and G. Mahler. Distribution of local entropy in the hilbert-space of bi-partite quantum systems: origin of Jaynes’ principle. *Euro. Phys. J. B*, 31:249–257, 2003.
- [15] A. Otte. *Separabilität in Quantennetzwerken*. PhD thesis, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2001.
- [16] Fritz Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Springer Series in Synergetics. Springer, 2nd revised and enlarged edition edition, 2001.
- [17] P. Borowski. Quantenthermodynamische Maschinen und Prozesse. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 2002.
- [18] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Elements de Physique Statistique*. Hermann Editeurs des Sciences et des Arts, Paris, 1989.
- [19] H.-P. Breuer and F. Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2002.
- [20] M. Hartmann, G. Mahler, and O. Hess. Local Versus Global Thermal States: Correlations and the Existence of Local Temperatures. *quant-ph/0404164*, 2004.
- [21] Michael Hartmann. persönliche Mitteilung.
- [22] M. Michel, M. Hartmann, J. Gemmer, and G. Mahler. Fourier’s Law confirmed for a class of small quantum systems. *Euro. Phys. J. B*, 34:325–330, 2003.
- [23] H. J. Kreuzer. *Nonequilibrium Thermodynamics and its statistical foundation*. Clarendon Press, Oxford, 1981.
- [24] P. Garrido, P. Hurtado, and B. Nadrowski. Simple one-dimensional model of heat conduction which obeys fourier’s law. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5486–5489, 2001.
- [25] M. Hartmann, J. Gemmer, G. Mahler, and O. Hess. Scaling behavior of interactions in a modular quantum system and the existence of local temperature. *Euro. Phys. Lett.*, 65:613–619, 2004.



[26] <http://www.oonumerics.org/blitz/>.

[27] <http://www.nag.co.uk/numeric/CL/CLdescription.asp>.



# Danksagung

Zu guter Letzt möchte ich den folgenden Personen danken, ohne deren Hilfe diese Arbeit nicht zu einem erfolgreichen Abschluß gebracht worden wäre:

meinen Eltern Ursula und Klaus Henrich, die mich finanziell unterstützten und mir die Freiheit für mein Studium ließen,

Prof. Dr. G. Mahler für die gute Betreuung und die Möglichkeit, die vorliegende Diplomarbeit anzufertigen, sowie für die anregenden Diskussionen und Hilfestellungen,

Prof. Dr. A. Muramatsu für die Übernahme des Mitberichts,

Prof. Dr. G. Wunner für die Aufnahme am 1. Theoretischen Institut,

M. Hartmann für das gute Arbeitsklima im Büro, die vielen kleinen und großen Hilfestellungen, die Beantwortung meiner vielen "einfachen" Fragen, das Korrekturlesen der Arbeit sowie die Fachgespräche über die wichtigste Nebensache der Welt: Fußball,

M. Michel für die Starthilfe und hilfreiche Ideen sowie Diskussionen,

H. Schmidt für die unzähligen Latex-Tipps sowie allen weiteren Mitgliedern der Arbeitsgruppe Mahler, F. Tonner, M. Stollsteimer sowie C. "Europameister" Kostoglou für viele angenehme Diskussionen und Unterhaltungen,

meiner Frau Gabi, für das Korrekturlesen der Diplomarbeit und für alles, was in Kürze nicht geschrieben werden kann.